

DIPLOMARBEIT

Die Fehlerstruktur der Impliziten Mittelpunktsregel bei steifen Differentialgleichungen

ausgeführt am Institut für Analysis and Scientific Computing der
Technischen Universität Wien

unter Anleitung von Univ-Prof. Dr. Winfried Auzinger

durch

Dr. Günter Pollak
Barichgasse 30/4/14, 1030 Wien

12. Mai 2017

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
1.1	Mathematikunterricht im 21. Jahrhundert: Neuer Lernstoff, neue Hilfsmittel, neue Herausforderungen	2
1.1.1	Rechenschieber und Taschenrechner	2
1.1.2	Statistik: Was sagt ein Datensatz aus ?	3
1.1.3	Differenzieren, Integrieren und Differentialgleichungen	4
1.1.4	Diskretisierung von Differentialgleichungen	5
1.1.5	Eine Differenzengleichung als Diskretisierung	6
1.2	Grundlagen	7
1.3	Einführung und Überblick	8
2	Die Fehlerstruktur der IMR	10
2.1	Explizite Formel für den globalen Fehler und Nachweis der Konvergenzordnung 2	10
2.2	Optimale B-Konvergenz der Ordnung 2 des globalen Fehlers	14
2.3	Entwicklung des Fehlers nach Potenzen von h^2 und Formulierung der Variationsgleichungen	17
2.4	Abschätzung des Restgliedes der asymptotischen Entwicklung	21
2.5	Herleitung eines Analogons zur Euler-Mc-Laurinschen Summenformel	24
3	Untersuchung der Fehlerstruktur der IMR bei steifen Modellgleichungen	28
3.1	Ein einfaches Beispiel	28
3.2	Das skalare Prothero-Robinson-Modell: $y' = \lambda(y - z(t)) + z'(t)$	32
3.3	Ausblick auf den allgemeinen Fall	36
4	Literatur	40
5	Lebenslauf	41

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Mathematikunterricht im 21. Jahrhundert: Neuer Lernstoff, neue Hilfsmittel, neue Herausforderungen

Jede Generation von Schülerinnen und Schülern¹ hat einen mehr oder weniger aussagekräftigen Namen. Derzeit wird von den Millenials oder der "Generation Y" gesprochen, aber davor gab es natürlich "Generation X" (in Deutschland die Generation Golf) und ich selbst gehöre noch zur Babyboomer - Generation, also den Jahrgängen zwischen 1960 und 1967, als nach Krieg und Wiederaufbau in Erwartung einer besseren Zukunft in Europa eine größere Anzahl von Kindern geboren wurde als in den Jahren davor. (Jenseits des Atlantiks war Wiederaufbau nicht notwendig, daher startete die Babyboomer Generation schon unmittelbar nach dem Ende des 2. Weltkriegs.)

1.1.1 Rechenschieber und Taschenrechner

Als ich 1970 die erste Klasse eines Gymnasiums besuchte, war soeben die verpflichtende Aufnahmeprüfung abgeschafft worden, aber Mathematik fand noch ausschließlich auf Papier statt. Als Rechenhilfsmittel wurde ab der dritten Klasse der Rechenschieber eingeführt, dessen logarithmische Skalen Multiplikation und Division mit einer gewissen Genauigkeit ermöglichten. Die richtige Zehnerpotenz des Resultats mussten die Schüler selbst herausfinden, wodurch ein Gefühl für die richtige Größenordnung einer Zahl automatisch trainiert wurde.

Diese elementare Kulturtechnik (d.h.: das Gefühl für die richtige Größenordnung) wurde nicht mehr trainiert, als der Taschenrechner Einzug in den Mathematikunterricht hielt. Man tippte die Zahlen ein, drückte auf die richtigen Tasten und fertig. Solange es sich noch um natürliche Zahlen handelte, war das kein großes Problem, aber sobald Dezimalzahlen verwendet wurden, bei denen es auf die richtige Position des Kommas ankam, gab es Schüler, die dabei kaum Fehler machten (weil sie dieses Gefühl noch hatten), während für andere Schüler die richtige Setzung der Kommata ein Problem war. Eine Null mehr oder weniger kam da schon öfter vor.

Als Lehrer an der HTL Rosensteingasse im Schuljahr 2011/2012 sah ich das leider häufig bei den 15-jährigen angehenden Chemikern. Dies motivierte mich, das Thema

¹Zu Gunsten der einfacheren Lesbarkeit werden wir ab jetzt nur mehr das männliche Geschlecht verwenden, sofern aus dem Zusammenhang klar ist, dass auch das weibliche Geschlecht mitgemeint ist. (Wenn spezifisch männliches oder weibliches Geschlecht gemeint ist, werden wir gesondert darauf hinweisen.)

“Größenabschätzungen” als meinen ganz persönlichen Schwerpunkt des Mathematikunterrichtes in dieser HTL-Klasse zu wählen. Ich erklärte das den Schülern folgendermaßen: Wenn ein Chemiker nicht korrekt zwischen einem Milligramm und 100 Mikrogramm unterscheidet, dann ist die Dokumentation der Ergebnisse seines Experimentes nur mehr für den Papierkorb.

1.1.2 Statistik: Was sagt ein Datensatz aus ?

Als ich im Jahr 1981 die Matura ablegte, hatte ich im Fach Mathematik niemals eine Aufgabe aus dem Bereich Statistik gesehen. Man las bisweilen in der Zeitung, eine gewisse Aussage sei “statistisch bewiesen worden”, aber ich kannte niemanden in meiner Altersklasse, der sich darunter etwas vorstellen konnte. Nicht in meiner Schulklasse, aber auch nicht unter den besten Mathematikschülern meines Alters aus ganz Österreich, die zusammen mit mir in den Jahren 1979, 1980 und 1981 unser Heimatland bei der IMO (Internationale Mathematische Olympiade) vertreten hatten. Man hörte wohl manchmal “Glaube keiner Statistik, die du nicht selbst gefälscht hast”, aber damit wurde Statistik für uns hardcore-Mathematiker nur im Bereich der “soft science” verortet, also bei den Geisteswissenschaften, wo sich die Psychologen und Wirtschaftsforscher tummelten. In einem Umfeld, wo es mehr darauf ankam, herauszufinden, was der Prüfer eigentlich hören wollte, als auf ein genaues Erkennen und Beschreiben der Realität. Genau deswegen hatten wir aber (zumindest meine Kollegen der Mathematikolympiade) unser Mathematikstudium an der TU Wien begonnen: So hofften wir dem Zwang zu entgehen, unsere Zeit mit “soft science” zu vergeuden.

Als ich im Jahr 2012 mein fachdidaktisches Praktikum an einer AHS absolvieren durfte, konnte ich einige Mathematikstunden der 4. Klasse beobachten und mitgestalten, wobei auch die statistischen Auswertung von Datensätzen ein Thema war. Es gab eine Aufgabe mit PISA-Test-Ergebnissen von einigen europäischen Ländern, darunter Finnland, Deutschland, Österreich und Griechenland. Es wurde ersichtlich, dass es hauptsächlich auf die Quantile eines Datensatzes ankommt, um Erfolg oder Misserfolg einer Bildungspolitik zu beurteilen. (Einfacher ausgedrückt: Wie gut “der Großteil der Schüler” beim Test abschneidet.) Aber auch dort sah ich noch keine Beispiele im Mathematikbuch, die sich mit “Lügen per Statistik” beschäftigten. Mittlerweile habe ich aber ein Mathematikbuch gefunden, das wirklich zeigt, wie man denselben Datensatz auf zwei verschiedene Arten darstellen kann. Einmal so, dass sich der durchschnittliche Betrachter denkt: “Sieht eigentlich ganz gut aus!”. Das andere Mal so, dass dieser Beobachter wohl denkt: “Sieht aus, als hätten wir ein Problem!”. Allerdings ist das Lehrbuch schon für die 6. Klasse AHS. Ob dieser Sachverhalt in anderen Schulbüchern schon früher gelehrt wird, entzieht sich meiner Kenntnis, aber ich würde es mir wünschen.

“Wissenschaftliche” Taschenrechner, die in der Oberstufe der AHS oder in berufsbildenden höheren Schulen verwendet werden, enthalten mittlerweile Statistikpakete, mit denen man die gängigen statistischen Maßzahlen wie Mittelwert, Modus, Median, Quantile, Varianz, Standardabweichung, etc. schnell ausrechnen kann.

Ich kann nur hoffen, dass dieses Hilfsmittel von den Lehrern dazu genutzt wird, sich während des Unterrichts eingehender mit der Definition und der Bedeutung von statistischen Maßzahlen zu beschäftigen. Beispielsweise sind Frauen durchschnittlich genauso intelligent wie Männer, bei der Standardabweichung gibt es hingegen ganz klare Unterschiede. Was zur Folge hat, dass bei echten Spitzenleistungen das männliche Geschlecht die Nase vorn hat. wie man an Nobelpreisträgern, oder noch stärker bei Schachweltmeistern sieht. Das im Unterricht zu diskutieren, wäre hilfreich. Es wäre auch

hilfreich, wenn es für das Lehrerkollegium und die Direktion nicht (sehr) von Belang wäre, ob (Eltern von) Schülerinnen sich darüber beschwerten, dass der Unterricht über solche statistische Fakten nicht ausreichend “gender-neutral” sei.²

1.1.3 Differenzieren, Integrieren und Differentialgleichungen

Als ich 1981 zur Matura antrat, bestand der Mathematikunterricht in den letzten beiden Schulstufen hauptsächlich aus “Differenzieren” (7. Klasse Gymnasium) und “Integrieren” (8. Klasse Gymnasium). Differenzieren war ein Handwerk: Anwendung einer kleinen Anzahl von Regeln lieferte immer ein Ergebnis. Integrieren war hingegen eine Kunst: Kenntnis einer größeren Anzahl von Stammfunktionen sowie einer größeren Anzahl von Integrationsregeln war erforderlich, um das korrekte Ergebnis zu erhalten.

Kompliziertere Funktionen waren auf diese Weise nicht integrierbar, es gab also keine geschlossene Formel für die Stammfunktion. Funktionen mit Quadratwurzeln waren die ersten solchen Beispiele, insbesondere der Umfang einer Ellipse. Da aber mit Obersummen, Untersummen und dann mit der Ermittlung des Flächeninhalts von Polynomfunktionen genug Zeit verbraucht war, blieb am Ende nichts weiter als eben die Erkenntnis: “Nicht alle Funktionen haben eine Stammfunktion, die sich in einer geschlossenen Formel darstellen lässt.”

Differentialgleichungen kamen im Mathematikunterricht dieser Zeit noch nicht vor. Es gab die Definition der Stammfunktion $F'(x) = f(x)$, aber der Begriff “Differentialgleichung” wurde dafür nicht verwendet. In heutigen Mathematik- und Physikunterricht werden einfache Differentialgleichungen $y' = by$ oder $y'' = by$ behandelt, deren Lösungen sich mittels Exponentialfunktion und Winkelfunktionen in geschlossener Form darstellen lassen. Außerdem gibt es als neues Gebiet “Dynamische Prozesse”, in dem komplexere Abhängigkeiten von Größen mit Hilfe von Kausaldiagrammen und Flussdiagrammen dargestellt werden, und Phänomene wie positive und negative Rückkopplung beschrieben werden. Diese Beschreibung bleibt allerdings qualitativ. Als letztes Kapitel des Stoffgebietes “Dynamische Prozesse” werden dann Differenzengleichungen besprochen, die eine erste Diskretisierung der Differentialgleichungen darstellen, die das dynamische System beschreiben. Aber auch diese Beschreibung bleibt qualitativ, der einzige dynamische Prozess, der durch eine Differenzengleichung diskretisiert wird, entspricht der Zinseszinsrechnung, die schon in der 6. Klasse mit Hilfe geometrischer Reihen behandelt wurde.³ Diskretisierungen von Differentialgleichungen die feiner sind als “Schrittweite ein Tag” für die Berechnung der Zinsen auf einem Bankkonto, habe ich bisher in keinem AHS-Lehrbuch der Mathematik entdecken können. Aber man kann den Schülern immerhin davon erzählen, wenn nach der Zinseszinsrechnung noch Zeit bleibt. Am Ende des Kapitels “Dynamische Prozesse” der 8. Klasse wird wegen Matura-Stress leider kaum die Möglichkeit dazu sein, es sei denn, man behandelt die dynamischen Systeme schon früher im Schuljahr. Für die Matura wird aber wohl eine ausreichende Übung von Integralrechnung und Statistik wichtiger sein.

²Diese Diplomarbeit wird an der TU Wien eingereicht, müsste sie an der Universität Wien eingereicht werden, würde dieser Absatz möglicherweise entfallen. Siehe Beginn des Kapitels über “soft science”.

³Im aktuellen Lehrplan steht “Verwenden von Folgen zur Beschreibung diskreter Prozesse in anwendungsorientierten Bereichen “(insbesondere Geldwesen)”

1.1.4 Diskretisierung von Differentialgleichungen

Man kann im Schulunterricht jedoch eine Diskretisierung der Zinseszinsrechnung von der in der Praxis verwendeten Schrittweite "ein Jahr" zu kleineren Schrittweiten vornehmen. Man verwendet dazu den Fall, dass der Kunde sich Kapital + Zinsen halbjährlich auszahlen lässt und damit zu Jahresende nicht mehr

$$K \times (1 + \frac{p}{100})$$

sondern

$$K \times (1 + \frac{p}{200})^2 = K \times [1 + \frac{p}{100} + (\frac{p}{200})^2]$$

auf seinem Konto vorfindet.

Für $p = 1$ ergibt sich dadurch eine effektive Verzinsung von $1 + 1/400 = 1,0025$ %. Bei einem Vermögen von 100000.- (Höchstgrenze der gesetzlich gesicherten Einlagen pro Bank laut §12 ESAEG) wäre der Zinsgewinn nur 2.50, was für die nötigen Wege in die Bank nur einen sehr geringer Stundenlohn ergeben würde.

Bei einem Zinssatz von 4% wäre der Zinsgewinn hingegen schon 10.-, daher könnten die Schüler es doch interessant finden, wie hoch der Zinsgewinn ansteige, würde man jeden Bankwerktag diese Transaktion tätigen. Die Formel dazu wäre

$$K \times (1 + \frac{p}{100} \frac{1}{360})^{360} = K \times [1 + \frac{p}{100} + \binom{360}{2} (\frac{p}{36000})^2 + \dots]$$

was einen Zinsgewinn in zweiter Näherung von

$$\frac{1}{2} \times \frac{p}{100} \times \frac{359}{360} \times \frac{p}{100}$$

entspricht. Unter den obigen Voraussetzungen könnte also bei einem Zinssatz nach KEST von 1% ein effektiver Zinssatz von ca. 1,005 % erreicht werden. Würde man die Schrittweite weiter verkleinern, erreichte man schließlich den Wert von

$$K \times [1 + \frac{p}{100} + \frac{1}{2!} (\frac{p}{100})^2 + \frac{1}{3!} (\frac{p}{100})^3 + \dots] = K \times e^{\frac{p}{100}}$$

aber auch dieser Wert ist nur unwesentlich größer als der Zinssatz nach KEST multipliziert mit 1,005.

Mit diesen Überlegungen hat man eine Diskretisierungen der Differentialgleichung $y' = by$ mit $b = p/100$ vorgenommen, In der 8. Klasse, wenn diese Differentialgleichung behandelt wird, sollte man darauf zurückkommen.

Obwohl die inhomogene Differentialgleichung $y'(x) = by(x) + g(x)$ im Schulunterricht nicht mehr vorkommt, kann man die Zinseszinsrechnung für regelmäßige Einzahlungen dazu verwenden, einen Ausblick auf die Lösung dieser Differentialgleichung geben. Wird beispielsweise monatlich ein fixer Geldbetrag $G/12n$ auf ein Sparkonto eingezahlt, so ermittelt sich das Kapital zum Ende der Laufzeit von n Jahren zu

$$K_n = \frac{G}{12n} \sum_{k=0}^{12n} (1 + \frac{p}{100})^{\frac{k}{12}} \quad n \geq 1$$

Wenn man auch hier von monatlicher Einzahlung zu täglicher Einzahlung eines entsprechend kleineren Betrags übergeht, werden die Summanden kleiner, während die Summe länger wird:

$$K_n = \frac{G}{360n} \sum_{k=0}^{360n} (1 + \frac{p}{100})^{\frac{k}{360}} \quad n \geq 1$$

Wenn man noch kleinere Zeitintervalle wählt, (und die Zinsen auch für diese kleinen Zeitintervalle kontinuierlich berechnet werden) nähert sich die Summe schließlich dem Integral

$$K(x) = G \int_0^x \left(1 + \frac{p}{100}\right)^t dt = \int_0^x G \left(1 + \frac{p}{100}\right)^t dt$$

1.1.5 Eine Differenzengleichung als Diskretisierung

Nach dem im vorigen Abschnitt beschriebenen Rückgriff auf die Zinseszinsrechnung, der schön den Übergang von Summe zu Integral illustriert, kann man schließlich als Beispiel für eine mit Mittelschulwissen lösbare Differenzengleichung die Diskretisierung der inhomogenen Differentialgleichung $y'(x) = by(x) + g(x)$ betrachten.

Die Differenzengleichung, welche die obige Differentialgleichung diskretisiert hat die Form $u_{i+1} = a u_i + g_i$ mit einem Anfangswert u_0 . In den obigen Beispielen aus der Zinseszinsrechnung war g_i konstant, jetzt können in jedem Schritt beliebige Werte für g_i gewählt werden. Damit kann man die g_i als Diskretisierung einer zeitabhängigen Funktion $g(t)$ betrachten und sucht jetzt die entsprechenden Werte u_i für die Funktion $y(t)$ aus der inhomogenen Differentialgleichung:

$$u_{i+1} = a u_i + g_i$$

$$u_1 = a u_0 + g_0$$

$$u_2 = a u_1 + g_1 = a^2 u_0 + a g_0 + g_1$$

$$u_n = a^n u_0 + \sum_{k=0}^{n-1} a^{n-1-k} g_k$$

Die Formel für u_n müsste man eigentlich mit vollständiger Induktion beweisen, und dies geht über den derzeitigen Lehrplan hinaus. Genauso wie bei den Summenformeln für die geometrische Reihe kann man aber zeigen, dass aus den Summenformeln für u_{n+1} und u_n wieder die Differenzengleichung $u_{n+1} = a u_n + g_n$ folgt, und diese Begründung mag auf dieser Stufe des mathematischen Verständnisses ausreichend sein.

Die diskreten u_i sind Werte der kontinuierlichen Funktion $y(t)$ zum Zeitpunkt t_i . Wählt man auch hier die Zeitpunkte t_i immer näher beieinander, (so wie im vorigen Kapitel die Zeitpunkte der Verzinsung von jährlich zu monatlich und schließlich zu täglich wechseln) so geht die obige Lösungsformel der Differenzengleichung schließlich in das Integral

$$y(x) = y(0)e^{bx} + e^{bx} \int_0^x g(t)e^{-bt} dt$$

über.

Genauso wie Integrale sind auch viele Differentialgleichungen nicht in einer geschlossenen Formel lösbar. Man kann jedoch mittels einer Diskretisierung stets Funktionen finden, welche die Differentialgleichung näherungsweise lösen, in einem bestimmten Bereich mit einer bestimmten maximalen Abweichung. Diese Tatsache kann man abschließend mit den Schülern diskutieren

Die weiteren Kapitel dieser Diplomarbeit beschreiben eine spezielle Diskretisierung von speziellen Differentialgleichungen.

1.2 Grundlagen

Die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\begin{aligned} y'(t) &= f(t, y(t)) \\ y(0) &= z_0 \end{aligned} \tag{1.1 - 1}$$

habe auf dem Intervall $t \in [0, T]$ die exakte Lösung $z(t)$. Dabei sei $z(t)$ ein s -dimensionaler Vektor mit reellen Komponenten und $f(t, y)$ eine Abbildung $I \times \mathcal{B} \mapsto \mathbb{R}^s$, wobei gilt $[0, T] \subset I \subset \mathbb{R}, \mathcal{B} \subset \mathbb{R}^s$.

Auf $\mathbb{R}^s$ sei ein Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ definiert und mit $u \in \mathbb{R}^s$ sei $\|u\| := \sqrt{\langle u, u \rangle}$. Ist A eine lineare Abbildung $\mathbb{R}^s \mapsto \mathbb{R}^s$, so definieren wir die Norm von A durch

$$\|A\| := \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

Wir geben eine Schrittweite $h = T/n$ vor und definieren im Intervall $[0, T]$ folgende Punkte:

$$\begin{aligned} t_\nu &= \nu \cdot h & \nu &= 0, 1, \dots, n \\ \hat{t}_\nu &= (\nu - \frac{1}{2})h = \frac{t_\nu + t_{\nu-1}}{2} & \nu &= 1, 2, \dots, n \end{aligned} \tag{1.1 - 2}$$

Im folgenden nehmen wir an, daß die obige Gleichung eine glatte Lösung $z(t)$ besitze, das heißt, $z(t)$ und die Ableitungen von $z(t)$ bis zur benötigten Ordnung existieren und von mäßiger Größenordnung sind. Dasselbe soll auch für $f(t, y)$ gelten (hier gibt es natürlich auch gemischte Ableitungen nach y und nach t) mit der Ausnahme, daß $\|f_y\|$ groß werden darf.

Zwei Begriffe, die wir brauchen, um das Verhalten von $f(t, y)$ zu beschreiben, sind *Lipschitz-Stetigkeit* und *einseitige Lipschitz-Stetigkeit*.

Sei $\mathcal{B}$ eine offene Menge $\subset \mathbb{R}^s$ und I eine offene Menge $\subset \mathbb{R}$.

Wir bezeichnen die Funktion $f(t, y)$ als Lipschitz-stetig bezüglich y auf einem Bereich $I \times \mathcal{B} \subset \mathbb{R}^{s+1}$, wenn es eine Konstante L gibt, sodaß für alle $t \in I$ und für alle $x, y \in \mathcal{B}$ folgende Ungleichung gilt

$$\|f(t, x) - f(t, y)\| \leq L \cdot \|x - y\| \tag{1.1 - 3}$$

Als einseitig Lipschitz-stetig bezeichnen wir $f(t, y)$, wenn es eine Konstante m gibt, sodaß für alle $t \in I$ und für alle $x, y \in \mathcal{B}$ gilt

$$\langle f(t, x) - f(t, y), x - y \rangle \leq m \cdot \|x - y\|^2 \tag{1.1 - 4}$$

Die eben eingeführten Begriffe wollen wir jetzt in Bedingungen für f_y übersetzen.

Lemma 1.1.1

Sei $f(t, y)$ auf einem Bereich $I \times \mathcal{B}$ Lipschitz-stetig mit der Lipschitz-Konstanten L und dort nach y differenzierbar. Dann gilt

$$\|f_y(t, x)\| \leq L \quad \forall (t, x) \in I \times \mathcal{B} \tag{1.1 - 5}$$

Beweis

Da $I \times \mathcal{B}$ eine offene Menge ist, gibt es noch eine ganze Kugel um x mit Radius ρ , in der die Voraussetzungen gelten. Sei $u \in \mathbb{R}^s$ ein beliebiger Einheitsvektor und $\varepsilon < \rho$. Aus der Differenzierbarkeit von $f(t, y)$ am Punkt x folgt

$$f(t, x + \varepsilon u) - f(t, x) = f_y(t, x)\varepsilon u + R(x, \varepsilon u) \tag{1.1 - 6}$$

$$\|R(x, \varepsilon u)\| = o(\varepsilon)$$

Wir wenden auf die linke Seite die Lipschitzbedingung (1.1-3) an und unter Beachtung der Homogenität von f_y und $\|\cdot\|$ folgt daraus

$$L\varepsilon\|u\| \geq \varepsilon\|f_y(t, x)u\| + o(\varepsilon)$$

Division durch $\varepsilon\|u\|$ und $\varepsilon \rightarrow 0$ liefert

$$L \geq \frac{\|f_y(t, x)u\|}{\|u\|}$$

Daraus folgt durch Supremumbildung über u die Behauptung.

q.e.d.

Lemma 1.1.2

Sei $f(t, y)$ auf einem Bereich $I \times \mathcal{B}$ einseitig Lipschitz-stetig mit der einseitigen Lipschitz-Konstanten m und dort nach y differenzierbar. Dann gilt

$$\langle f_y(t, x)u, u \rangle \leq m \cdot \|u\|^2 \quad \forall (t, x) \in I \times \mathcal{B} \quad \forall u \in \mathfrak{R}^s \quad (1.1 - 7)$$

Beweis

Wenn man in (1.1-6) auf beiden Seiten das Skalarprodukt mit dem Vektor εu bildet und dann auf die linke Seite die einseitige Lipschitzbedingung (1.1-4) anwendet, so erhält man

$$\langle f_y(t, x)\varepsilon u, \varepsilon u \rangle + \langle R(x, \varepsilon u), \varepsilon u \rangle \leq m\|\varepsilon u\|^2 = m\varepsilon^2$$

Wir nützen die Linearität von f_y und $\langle \cdot, \cdot \rangle$ aus, und wenden die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung an.

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 \langle f_y(t, x)u, u \rangle &\leq m\varepsilon^2 - \langle R(x, \varepsilon u), \varepsilon u \rangle \\ &\leq m\varepsilon^2 + \|R(x, \varepsilon u)\|\varepsilon \end{aligned}$$

Division durch ε^2 und $\varepsilon \rightarrow 0$ liefert die Behauptung.

q.e.d.

Die lineare Abbildung $f_y(t, z(t)) : \mathfrak{R}^s \mapsto \mathfrak{R}^s$ habe reelle oder paarweise konjugiert komplexe Eigenwerte $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s$. Sei nun die Differentialgleichung (1.1-1) gut konditioniert (was zwingend erfordert, daß es keinen Eigenwert mit stark positivem Realteil gibt), es gebe aber zumindest ein λ_i mit stark negativem Realteil. Dann bezeichnen wir (1.1-1) als *steife Differentialgleichung*.

In dieser Diplomarbeit verwenden wir als Diskretisierung von (1.1-1) die *implizite Mittelpunktsregel* (IMR):

$$\begin{aligned} \frac{\eta_\nu - \eta_{\nu-1}}{h} &= f\left(\hat{t}_\nu, \frac{\eta_{\nu-1} + \eta_\nu}{2}\right) \\ \eta_0 &= z(0) \end{aligned} \quad (1.1 - 8)$$

1.3 Einführung und Überblick

Man weiß schon seit längerer Zeit, daß der Fehler zwischen der exakten Lösung eines Anfangswertproblems und der durch ein diskretes (z.B. Runge-Kutta-) Verfahren gewonnenen Werte an Stützstellen t_ν , nicht nur eine, für das Verfahren charakteristische Größenordnung $O(h^p)$ besitzt, sondern oft darüber hinaus eine "asymptotischen Entwicklung"

$$\eta_\nu = z(t_\nu) + h^p e_p(t_\nu) + h^{p+1} e_{p+1}(t_\nu) + \cdots + h^m e_m(t_\nu) + R_{\nu, m+1} \quad (1.2-1)$$

mit Fehlerfunktionen $e_k(t)$ und einem Restglied $R_{\nu, m+1} = O(h^{m+1})$. Diese Information über die Fehlerstruktur eines Verfahrens ist bei der Konstruktion von Algorithmen zur Fehlerkorrektur von großem Nutzen. Bei steifen Differentialgleichungen ist eine derartige asymptotische Entwicklung des Fehlers in der Form (1.2-1) nur dann brauchbar, wenn bei einem solchen Ansatz die Beträge der e_k mit wachsender Steifheit des Problems nicht explodieren.

Im zweiten Kapitel werden wir zuerst das schon lange bekannte Konvergenzresultat und das noch nicht so lange bekannte B-Konvergenzresultat der impliziten Mittelpunktsregel nochmals herleiten. Sodann werden wir den Fehler in der Form (1.2-1) entwickeln und dabei feststellen, daß es genügt, nach Potenzen von h^2 zu entwickeln. Nach Formulierung der definierenden Gleichungen für die $e_{2k}(t)$, der sogenannten Variationsgleichungen, wollen wir eine Rekursion für das Restglied $R_{\nu, 2m+2}$ gewinnen. Die Größenordnung dieses Restgliedes werden wir dann mit sehr ähnlichen Methoden wie bei der Behandlung des globalen Fehlers abschätzen. Die gewonnenen Aussagen über die Konvergenz des Restgliedes werden also aus einem gewissen Blickwinkel zu Verallgemeinerungen der Konvergenz- und B-Konvergenzresultate des globalen Fehlers.

Die wesentliche Aussage des zweiten Kapitels wird die Tatsache sein, daß das Konvergenzverhalten des Restgliedes vor allem von der Glattheit der e_{2k} abhängt. Nachdem wir dargestellt haben, daß dies im klassischen Fall gewährleistet ist, und im steifen Fall nicht, werden wir noch, als Anwendungsbeispiel für den Kalkül der Variationsgleichungen, das Analogon zur Euler-Mc-Laurinschen Summenformel herleiten. Im dritten Kapitel werden wir versuchen, anhand von Modellen zu demonstrieren, wie die Fehlerstruktur der impliziten Mittelpunktsregel bei steifen Differentialgleichungen aussieht. Eine wesentliche Eigenschaft steifer Differentialgleichungen ist bekanntlich, daß bei ihrer numerischen Behandlung nur implizite Verfahren als brauchbare Methoden herangezogen werden können. Das einfachste Verfahren dieser Art ist das implizite Eulerverfahren, über welches schon einige Ergebnisse vorliegen. Ein wenig komplizierter liegen die Dinge bei der impliziten Trapezregel, mit der sich eine parallel entstandene Diplomarbeit [4] befaßt, und bei der IMR, mit der wir uns beschäftigen. Am Beispiel $y' = \lambda(y + e^{-t}) + e^{-t}$ werden wir beobachten, daß das Restglied immer einen oszillierenden Term der Ordnung h^2 enthält. Die Oszillation wird umso reiner, je steifer ($\lambda \rightarrow -\infty$) das Problem ist. Wir werden diesen Term als fiktiven Startfehler $R_{0, 2m+2}$ interpretieren, und feststellen, daß wir dann glatte Lösungen der Variationsgleichungen erhalten können, wenn wir $R_{0, 2m+2} \neq 0$ zulassen. Diese Überlegungen wiederholen wir in allgemeinerer Form beim skalaren Prothero–Robinson–Modell $y' = \lambda(y - z(t)) + z'(t)$ und werden schließlich feststellen, daß sich dort der Fehler $\eta_\nu - z(t_\nu)$ in einen regulären und einen oszillierenden Term aufspalten läßt, wobei der reguläre Term so wie im klassischen Fall eine asymptotische Entwicklung besitzt.

Im letzten Abschnitt von Kapitel 3 werden wir demonstrieren, daß es auch im allgemeinen nichtlinearen Fall glatte Lösungen der Variationsgleichungen gibt, die man dadurch finden kann, indem man den Ansatz der singulären Störungstheorie unter Weglassung der schnellen Variablen verwendet. Das Problem bleibt offen, wie sich das Restglied verhält und wie sich die Oszillation aus den Modellen auf die nichtlineare Situation verallgemeinert.

Kapitel 2

Die Fehlerstruktur der IMR

2.1 Explizite Formel für den globalen Fehler und Nachweis der Konvergenzordnung 2

Herleitung einer Rekursion für den globalen Fehler $R_\nu = \eta_\nu - z(t_\nu)$

Wir schreiben η_ν als $z(t_\nu) + R_\nu$ und setzen in die implizite Mittelpunktsregel (1.1-8) ein:

$$\frac{z(t_\nu) - z(t_{\nu-1})}{h} + \frac{R_\nu - R_{\nu-1}}{h} = f\left(\hat{t}_\nu, \frac{z(t_\nu) + z(t_{\nu-1})}{2} + \frac{R_\nu + R_{\nu-1}}{2}\right) \quad (2.1-1)$$

Taylorentwicklung um den Punkt $\hat{t}_\nu$ liefert

$$z(t_\nu) = z\left(\hat{t}_\nu + \frac{h}{2}\right) = z(\hat{t}_\nu) + \frac{h}{2}z'(\hat{t}_\nu) + \frac{h^2}{4} \int_0^1 z''\left(\hat{t}_\nu + \frac{h}{2}\sigma\right) (1-\sigma) d\sigma \quad (2.1-2)$$

$$z(t_{\nu-1}) = z\left(\hat{t}_\nu - \frac{h}{2}\right) = z(\hat{t}_\nu) - \frac{h}{2}z'(\hat{t}_\nu) + \frac{h^2}{4} \int_0^1 z''\left(\hat{t}_\nu - \frac{h}{2}\sigma\right) (1-\sigma) d\sigma \quad (2.1-3)$$

Die beiden auftretenden Integrale bezeichnen wir fortan mit I_ν^+ und I_ν^- . Einsetzen der Entwicklungen in (2.1-1) ergibt

$$\begin{aligned} z'(\hat{t}_\nu) + \frac{h^2}{4} \frac{I_\nu^+ - I_\nu^-}{h} + \frac{R_\nu - R_{\nu-1}}{h} \\ = f\left(\hat{t}_\nu, z(\hat{t}_\nu) + \frac{h^2}{4} \frac{I_\nu^+ + I_\nu^-}{2} + \frac{R_\nu + R_{\nu-1}}{2}\right) \end{aligned} \quad (2.1-4)$$

Die Funktion f wird bezüglich ihres zweiten Arguments entwickelt:

$$f(t, \tilde{y}) = f(t, y) + \int_0^1 f_y(t, y + \sigma(\tilde{y} - y)) d\sigma \cdot (\tilde{y} - y) \quad (2.1-5)$$

Mit der Definition

$$J_\nu := \int_0^1 f_y\left(\hat{t}_\nu, z(\hat{t}_\nu) + \sigma \left[\frac{h^2}{4} \frac{I_\nu^+ + I_\nu^-}{2} + \frac{R_\nu + R_{\nu-1}}{2} \right]\right) d\sigma \quad (2.1-6)$$

$$J_\nu = J_\nu\left(\frac{R_\nu + R_{\nu-1}}{2}\right)$$

ergibt sich aus (2.1-4) unter Beachtung von $z'(t) = f(t, z(t))$

$$\frac{R_\nu - R_{\nu-1}}{h} + \frac{h^2}{4} \frac{I_\nu^+ - I_\nu^-}{h} = J_\nu \left[\frac{R_\nu + R_{\nu-1}}{2} + \frac{h^2}{4} \frac{I_\nu^+ + I_\nu^-}{2} \right]$$

Bezeichnet I die identische Abbildung, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \left(I - \frac{h}{2} J_\nu \right) \left[R_\nu + \frac{h^2}{4} I_\nu^+ \right] &= \left(I + \frac{h}{2} J_\nu \right) \left[R_{\nu-1} + \frac{h^2}{4} I_\nu^- \right] \\ R_\nu &= \left(I - \frac{h}{2} J_\nu \right)^{-1} \left(I + \frac{h}{2} J_\nu \right) \left[R_{\nu-1} + \frac{h^2}{4} I_\nu^- \right] - \frac{h^2}{4} I_\nu^+ \end{aligned} \quad (2.1 - 7)$$

Mit der Definition der “growth function”

$$G_\nu := \left(I - \frac{h}{2} J_\nu \right)^{-1} \left(I + \frac{h}{2} J_\nu \right) \quad (2.1 - 8)$$

erhalten wir also folgende Rekursion für den globalen Fehler R_ν :

$$R_\nu = G_\nu \left[R_{\nu-1} + \frac{h^2}{4} I_\nu^- \right] - \frac{h^2}{4} I_\nu^+ \quad (2.1 - 9)$$

Nachweis der Konvergenzordnung 2 des Fehlers

$$R_\nu = \eta_\nu - z(t_\nu)$$

Um aus der Rekursion (2.1-9) eine Abschätzung für $\|R_\nu\|$ zu gewinnen, verschaffen wir uns zuerst eine Aussage über $\|G_\nu\|$ und $\|G_\nu \pm I\|$.

Lemma 2.1.1

$f(t, y)$ erfülle eine Lipschitzbedingung in einem geeigneten Bereich $I \times \mathcal{B}$ mit der Lipschitzkonstanten L , was nach Lemma 1.1.1 bedeutet, daß $\|f_y\| \leq L$. Sei weiters J_ν ein Integralmittelwert über f_y

$$J_\nu = \int_0^1 f_y(\hat{t}_\nu, z(\hat{t}_\nu) + \sigma \beta_\nu) d\sigma \quad (2.1 - 10)$$

wobei $z(\hat{t}_\nu) + \sigma \beta_\nu$ für alle $\sigma \in [0, 1]$ in $\mathcal{B}$ liegen soll,
die Schrittweite h nach oben beschränkt durch

$$\frac{h}{2} L \leq \rho < 1 \quad (2.1 - 11)$$

und die Größe $\hat{\gamma}$ durch

$$\hat{\gamma} := \frac{1 + \frac{h}{2} L}{1 - \frac{h}{2} L} \geq 1 \quad (2.1 - 12)$$

definiert sein soll. Dann gelten mit G_ν aus (2.1-8) folgende Abschätzungen

$$\|G_\nu\| \leq \hat{\gamma} \quad (2.1 - 13)$$

$$\|G_\nu - I\| \leq \hat{\gamma} - 1 \quad (2.1 - 14)$$

$$\|G_\nu + I\| \leq \hat{\gamma} + 1 \quad (2.1 - 15)$$

Beweis

Aus (2.1-10) folgt zuerst $\|J_\nu\| \leq L$. Bekanntlich läßt sich eine lineare Abbildung mit $\|A\| < 1$ in eine Neumannsche Reihe entwickeln, also gilt

$$\|(I - A)^{-1}\| \leq 1 + \|A\| + \|A\|^2 + \dots = \frac{1}{1 - \|A\|}$$

Wegen (2.1-11) können wir dieses Resultat auf $\frac{h}{2}J_\nu$ anwenden

$$\left\| \left(I - \frac{h}{2}J_\nu \right)^{-1} \right\| \leq \left(1 - \frac{h}{2}\|J_\nu\| \right)^{-1} \leq \left(1 - \frac{h}{2}L \right)^{-1}$$

Daher gilt

$$\begin{aligned} \|G_\nu\| &\leq \left\| \left(I - \frac{h}{2}J_\nu \right)^{-1} \right\| \cdot \left\| I + \frac{h}{2}J_\nu \right\| \leq \left(I - \frac{h}{2}\|J_\nu\| \right)^{-1} \left(I + \frac{h}{2}\|J_\nu\| \right) \leq \hat{\gamma} \\ \|G_\nu - I\| &= \left\| \left(I - \frac{h}{2}J_\nu \right)^{-1} \cdot \left(I + \frac{h}{2}J_\nu - I + \frac{h}{2}J_\nu \right) \right\| \leq \frac{hL}{1 - \frac{h}{2}L} = \hat{\gamma} - 1 \\ \|G_\nu + I\| &\leq \|G_\nu\| + 1 = \hat{\gamma} + 1 \end{aligned}$$

q.e.d.

Seien M_2 und M_3 Schranken für $\|z''(t)\|$ und $\|z'''(t)\|$ im Intervall $[0, T]$. Durch partielle Integration, beziehungsweise durch Fortsetzung der Entwicklungen (2.1-3) und (2.1-4) bis h^3 erhalten wir

$$\frac{h^2}{4}I_\nu^\pm = \frac{h^2}{8}z''(\hat{t}_\nu) + \frac{h^3}{48}K_\nu^\pm \quad (2.1 - 16)$$

wobei gilt $\|K^\pm\| \leq M_3$. Damit läßt sich jetzt zeigen, daß $R_\nu = O(h^2)$ für $R_0 = 0$ (Start auf der exakten Lösung) oder zumindest $R_0 = O(h^2)$.

Satz 2.1.2

Unter den Voraussetzungen von Lemma 2.1.1 und mit

$$r := \frac{1}{2\rho} \ln \left(\frac{1+\rho}{1-\rho} \right) \quad (2.1 - 17)$$

folgt für den Fehler der Mittelpunktsregel $R_\nu = \eta_\nu - z(t_\nu)$

$$\begin{aligned} \|R_\nu\| &\leq e^{rLt_\nu} \|R_0\| + \frac{e^{rLt_\nu} - 1}{L} \left(\frac{M_2}{8}L + \frac{M_3}{24} \right) h^2 && \text{wenn } L > 0 \\ \|R_\nu\| &\leq \|R_0\| + t_\nu \frac{M_3}{24} h^2 && \text{wenn } L = 0 \end{aligned} \quad (2.1 - 18)$$

Beweis

Aus (2.1-9) folgt mit (2.1-16)

$$\begin{aligned} \|R_\nu\| &= \|G_\nu R_{\nu-1} + (G_\nu - I) \frac{h^2}{8} z''(\hat{t}_\nu) + G_\nu \frac{h^3}{48} K_\nu^- - \frac{h^3}{48} K_\nu^+\| \\ &\leq \|G_\nu\| \cdot \|R_{\nu-1}\| + \frac{h^2}{8} \|G_\nu - I\| \cdot \|z''(\hat{t}_\nu)\| + \frac{h^3}{48} (\|G_\nu\| \cdot \|K_\nu^-\| + \|K_\nu^+\|) \end{aligned}$$

Mit Lemma 2.1.1 und den oben eingeführten Schranken M_2 und M_3 folgt daraus

$$\|R_\nu\| \leq \hat{\gamma}\|R_{\nu-1}\| + (\hat{\gamma} - 1)\frac{h^2}{8}M_2 + (\hat{\gamma} + 1)\frac{h^3}{48}M_3 \quad (2.1 - 19)$$

Nehmen wir zuerst an, daß $L > 0$, dann erhalten wir, indem wir (2.1-19) rekursiv anwenden:

$$\|R_\nu\| \leq \hat{\gamma}^\nu\|R_0\| + \frac{\hat{\gamma}^\nu - 1}{\hat{\gamma} - 1} \left[(\hat{\gamma} - 1)\frac{M_2}{8} + (\hat{\gamma} + 1)h\frac{M_3}{48} \right] h^2$$

beziehungsweise

$$\|R_\nu\| \leq \hat{\gamma}^\nu\|R_0\| + \frac{\hat{\gamma}^\nu - 1}{L} \left[\frac{M_2}{8}L + \frac{\hat{\gamma} + 1}{\hat{\gamma} - 1} \frac{hL}{2} \frac{M_3}{24} \right] h^2 \quad (2.1 - 20)$$

Nun folgt aus der Definition (2.1-12) für $\hat{\gamma}$ sowohl

$$\frac{\hat{\gamma} + 1}{\hat{\gamma} - 1} = \frac{2}{hL}$$

als auch mit r aus (2.1-17)

$$\hat{\gamma}^\nu = \left(\frac{1 + \frac{h}{2}L}{1 - \frac{h}{2}L} \right)^\nu = \left(\frac{1 + \frac{hL}{2}}{1 - \frac{hL}{2}} \right)^{\frac{2}{hL} \frac{Lt_\nu}{2}} \leq \left(\frac{1 + \rho}{1 - \rho} \right)^{\frac{1}{2\rho} Lt_\nu} = e^{rLt_\nu}$$

wobei die Abschätzung aus der Monotonie der Funktion

$$\frac{1}{2\rho} \ln \left(\frac{1 + \rho}{1 - \rho} \right) = 1 + \frac{\rho^2}{3} + \frac{\rho^4}{5} + \dots \quad (2.1 - 21)$$

im Intervall $[0, 1]$ folgt. Mit diesen zwei Beziehungen für $\hat{\gamma}$ und (2.1-20) folgt die Behauptung für $L > 0$. Ist hingegen $L = 0$, so wird $\hat{\gamma} = 1$ und wir erhalten aus (2.1-19) zunächst

$$\|R_\nu\| \leq \|R_{\nu-1}\| + \frac{h^3}{24}M_3$$

und durch rekursive Anwendung

$$\|R_\nu\| \leq \|R_0\| + \nu \frac{h^3}{24}M_3 = \|R_0\| + M_3 \frac{h^2}{24}t_\nu$$

q.e.d.

Bemerkung 2.1.3

Der eben bewiesene Satz ist ein schon lange bekanntes Resultat. Differenzierbarkeit von f , wie wir sie generell in Kapitel 1.1 gefordert haben ist bekanntlich nicht notwendig, es genügt Lipschitz-Stetigkeit. Im nächsten Kapitel behandeln wir die schärfere B-Konvergenzabschätzung, deren Beweis sehr ähnlich verläuft. Dort ist allerdings der Fall $m = 0$ wirklich relevant, während wir hier $L = 0$ eigentlich nur der Vollständigkeit halber bewiesen haben, denn wie man sich leicht überzeugt, ist 1.1-1 in diesem Fall keine Differentialgleichung im eigentlichen Sinn, sondern eine Quadratur. Außerdem werden wir in Kapitel 2.4 einen zu Satz 2.1.2 analogen Satz formulieren, der sich aber nicht auf den globalen Diskretisierungsfehler selbst, sondern auf das Restglied der asymptotischen Entwicklung des globalen Diskretisierungsfehlers bezieht.

2.2 Optimale B-Konvergenz der Ordnung 2 des globalen Fehlers

Wir wollen jetzt die Voraussetzung, daß f Lipschitz-stetig mit der Lipschitzkonstanten L ist, durch einseitige Lipschitz-Stetigkeit mit der einseitigen Lipschitz-Konstanten m ersetzen, und ein analoges Resultat zu (2.1-18) beweisen. Dabei läßt sich jedoch keine analoge Beziehung zu (2.1-14) zeigen, sodaß wir beim Bewies von $O(h^2)$ anders vorgehen müssen als bei Satz 2.1.2.

Lemma 2.2.1

Sei f einseitig Lipschitz-stetig im Bereich $I \times \mathcal{B}$ mit der nichtnegativen einseitigen Lipschitzkonstante m . J_ν sei definiert wie in (2.1-10) und analog zu Satz 2.1.2 gelte

$$\frac{h}{2}m \leq \tilde{\rho} < 1 \quad (2.2-1)$$

sowie die Abkürzung

$$\tilde{\gamma} := \frac{1 + \frac{h}{2}m}{1 - \frac{h}{2}m} \geq 1 \quad (2.2-2)$$

Dann gilt mit G_ν aus (2.1-8)

$$\|G_\nu\| \leq \tilde{\gamma} \quad (2.2-3)$$

$$2 \left\| \left(I - \frac{h}{2}J_\nu \right)^{-1} \right\| = \|G_\nu + I\| \leq \tilde{\gamma} + 1 \quad (2.2-4)$$

Beweis

Nach Lemma 1.1.2 gilt

$$\langle f_y(t, x)u, u \rangle \leq m\|u\|^2$$

für alle $x \in \mathcal{B}$ und alle $u \in \mathfrak{R}^s$. Wegen der Linearität des Skalarproduktes folgt

$$\langle J_\nu u, u \rangle \leq m\|u\|^2 \quad (2.2-5)$$

für alle $u \in \mathfrak{R}^s$. Daher können wir schließen

$$\begin{aligned} G_\nu x &= \left(I - \frac{h}{2}J_\nu \right)^{-1} \left(I + \frac{h}{2}J_\nu \right) x \\ (I - \frac{h}{2}J_\nu)G_\nu x &= (I + \frac{h}{2}J_\nu)x \\ G_\nu x - x &= \frac{h}{2}J_\nu(G_\nu x + x) \\ \langle G_\nu x - x, G_\nu x + x \rangle &= \frac{h}{2} \langle J_\nu(G_\nu x + x), G_\nu x + x \rangle \leq \frac{h}{2}m\|G_\nu x + x\|^2 \\ \|G_\nu x\|^2 - \|x\|^2 &\leq \frac{hm}{2}(\|G_\nu x\| + \|x\|)^2 \\ (\|G_\nu x\| - \|x\|)(\|G_\nu x\| + \|x\|) &\leq \frac{hm}{2}(\|G_\nu x\| + \|x\|)^2 \\ \|G_\nu x\| - \|x\| &\leq \frac{hm}{2}(\|G_\nu x\| + \|x\|) \\ \|G_\nu x\| \left(1 - \frac{h}{2}m \right) &\leq \|x\| \left(1 + \frac{h}{2}m \right) \\ \frac{\|G_\nu x\|}{\|x\|} &\leq \tilde{\gamma} \quad \forall x \in \mathfrak{R}^s \end{aligned}$$

Daraus folgt sofort (2.2-3) und (2.2-4)

q.e.d.

Für $\|G_\nu - 1\|$ könnten wir nur die Abschätzung 2 beweisen, das wäre nur B-Konvergenz der Ordnung 1. Mit einer Idee von [2] kann man aber doch die Ordnung 2 erreichen. Dazu formen wir unsere Rekursion (2.1-9) etwas um.

$$R_\nu + \frac{h^2}{4} I_{\nu+1}^- = G_\nu \left[R_{\nu-1} + \frac{h^2}{4} I_\nu^- \right] + \frac{h^2}{4} (I_{\nu+1}^- - I_\nu^+) \quad (2.2 - 6)$$

Satz 2.2.2

Unter den Voraussetzungen von Lemma 2.2.1, mit M_2, M_3 Schranken für $\|z''\|$ und $\|z'''\|$ auf $[0, T]$, und mit

$$\tilde{r} := \frac{1}{2\tilde{\rho}} \ln \left(\frac{1 + \tilde{\rho}}{1 - \tilde{\rho}} \right) \quad (2.2 - 7)$$

gilt für den Fehler $R_\nu = \eta_\nu - z(t_\nu)$ der IMR:

$$\begin{aligned} \|R_\nu\| &\leq e^{\tilde{r} m t_\nu} \|R_0\| + \left[\frac{e^{\tilde{r} m t_\nu} + 1}{8} M_2 + \frac{e^{\tilde{r} m t_\nu} - 1}{m} \frac{M_3}{12} \right] h^2 && \text{wenn } m > 0 \\ \|R_\nu\| &\leq \|R_0\| + \left(\frac{M_2}{4} + t_\nu \frac{M_3}{12} \right) h^2 && \text{wenn } m = 0 \end{aligned} \quad (2.2 - 8)$$

Beweis

Es gilt

$$I_{\nu+1}^- - I_\nu^+ = \left[I_{\nu+1}^- - \frac{z''(t_\nu)}{2} \right] + \left[\frac{z''(t_\nu)}{2} - I_\nu^+ \right] \leq \frac{h}{3} M_3 \quad (2.2 - 9)$$

denn mit $|z''(b) - z''(a)| \leq (b - a) M_3$ liefert der erste Ausdruck

$$\int_0^1 [z''(\hat{t}_{\nu+1} - \frac{h}{2}\sigma) - z''(t_\nu)] (1 - \sigma) d\sigma \leq M_3 \frac{h}{2} \int_0^1 (1 - \sigma)^2 d\sigma = \frac{h}{6} M_3$$

und ebenso der zweite

$$\int_0^1 [z''(t_\nu) - z''(\hat{t}_\nu + \frac{h}{2}\sigma)] (1 - \sigma) d\sigma \leq M_3 \frac{h}{2} \int_0^1 (1 - \sigma)^2 d\sigma = \frac{h}{6} M_3$$

Daher folgt aus (2.2-6) mit Lemma 2.2.1

$$\|R_\nu + \frac{h^2}{4} I_{\nu+1}^-\| \leq \tilde{\gamma} \|R_{\nu-1} + \frac{h^2}{4} I_\nu^-\| + \frac{h^3}{12} M_3 \quad (2.2 - 10)$$

Wir wenden diese Ungleichung jetzt rekursiv bis zum Glied $R_{\nu-1}$ an und erhalten so im Fall $m > 0$

$$\|R_{\nu-1} + \frac{h^2}{4} I_\nu^-\| \leq \tilde{\gamma}^{\nu-1} \|R_0 + \frac{h^2}{4} I_1^-\| + \frac{\tilde{\gamma}^{\nu-1} - 1}{\tilde{\gamma} - 1} \frac{h^3}{12} M_3$$

Aus der Rekursion für den Fehler R_ν in (2.1-9) erhalten wir

$$\begin{aligned} \|R_\nu\| &\leq \frac{h^2}{4} \|I_\nu^+\| + \tilde{\gamma} \|R_{\nu-1} + \frac{h^2}{4} I_\nu^-\| \\ &\leq \tilde{\gamma}^\nu \|R_0\| + (\tilde{\gamma}^\nu + 1) \frac{h^2}{8} M_2 + \frac{\tilde{\gamma}^\nu - \tilde{\gamma}}{\tilde{\gamma} - 1} \frac{h^3}{12} M_3 \end{aligned} \quad (2.2 - 11)$$

Ähnlich wie beim Beweis von Satz 2.1.2 gilt nun

$$\tilde{\gamma}^\nu \leq e^{\tilde{r}m t_\nu} \quad \text{sowie} \quad \tilde{\gamma} \geq 1$$

und auch

$$\frac{1}{\tilde{\gamma} - 1} = \frac{1 - \frac{h}{2}m}{hm} \leq \frac{1}{hm}$$

Mit diesen Abschätzungen folgt aus (2.2-11) die Behauptung für $m > 0$. Ist hingegen $m = 0$, so wird $\tilde{\gamma} = 1$; wir erhalten aus (2.2-9) durch rekursive Anwendung zunächst

$$\|R_{\nu-1} + \frac{h^2}{4}I_\nu^-\| \leq \|R_0 + \frac{h^2}{4}I_1^-\| + (\nu - 1)\frac{h^3}{12}M_3$$

und mit einem Schritt der Form (2.1-9) schließlich

$$\begin{aligned} \|R_\nu\| &\leq \|R_{\nu-1} + \frac{h^2}{4}I_\nu^-\| + \frac{h^2}{4}\|I_\nu^+\| \\ &\leq \|R_0 + \frac{h^2}{4}I_1^-\| + (\nu - 1)\frac{h^3}{12}M_3 \\ &\quad + \frac{h^2}{4}\|I_\nu^+\| \leq \|R_0\| + \frac{h^2}{4}M_2 + h(\nu - 1)\frac{h^2}{12}M_3 \\ &\leq \|R_0\| + \left(\frac{M_2}{4} + \frac{M_3}{12}t_\nu\right)h^2 \end{aligned} \tag{2.2 - 12}$$

q.e.d.

Bemerkung 2.2.4

Der eben geführte Beweis stammt im wesentlichen von [2] Es fällt auf, daß das Resultat (2.2-8) im skalaren Fall, wenn also $m > 0$ bedeutet, daß $m = L$, nicht in (2.1-18) übergeht. Wenn wir im skalaren Fall die Funktion $\lambda : [0, T] \mapsto \mathbb{R}^1$ gemäß

$$\lambda(t) := f_y(t, z(t))$$

definieren, so ist die Lipschitzkonstante L eine Schranke für $|\lambda(t)|$, während die einseitige Lipschitzkonstante m eine Schranke für $\lambda(t)$ selbst ist. Im Fall $\lambda(t) > 0$ ist daher (2.1-18) schärfer, im Fall $\lambda(t) \gg 0$ ist aber (2.2-8) weit überlegen!

Auch zu Satz 2.2.2 gibt es ein Analogon für das Restglied der asymptotischen Entwicklung; es hat jedoch den Schönheitsfehler, daß statt M_2 und M_3 dort Konstante stehen, die auch dann sehr groß werden können, wenn $z(t)$ eine glatte Lösung und m klein ist. Die Konstanten sind nur dann klein, wenn außer $z(t)$ auch die im nächsten Kapitel definierten e_{2k} glatte Funktionen sind.

2.3 Entwicklung des Fehlers nach Potenzen von h^2 und Formulierung der Variationsgleichungen

Wir machen für η_ν den Ansatz

$$\eta_\nu = z(t_\nu) + h^2 e_2(t_\nu) + h^4 e_4(t_\nu) + h^6 e_6(t_\nu) + R_{\nu,8} \quad (2.3-1)$$

mit den zu ermittelnden Funktionen e_2, e_4, e_6 , die unabhängig von der Schrittweite h sein sollen, und erhoffen uns eine Größenordnung von $R_{\nu,8}$ als $O(h^8)$. Auskunft über die Gestalt der e_{2k} und über eine Rekursion für das Restglied $R_{\nu,8}$ liefert folgender Satz⁴

Satz 2.3.1

Die e_{2k} aus dem Ansatz (2.3-1) sind Lösungen folgender Differentialgleichungen, der sogenannten Variationsgleichungen

$$e_2' + \frac{z'''}{2^2 3!} = f_y \left(e_2 + \frac{z''}{2^2 2!} \right) \quad (2.3-2)$$

$$\begin{aligned} e_4' + \frac{e_2'''}{2^2 3!} + \frac{z^{(5)}}{2^4 5!} &= f_y \left(e_4 + \frac{e_2''}{2^2 2!} + \frac{z^{(4)}}{2^4 4!} \right) \\ &+ \frac{1}{2!} f_{yy} \left(e_2 + \frac{z''}{2^2 2!}, e_2 + \frac{z''}{2^2 2!} \right) \end{aligned} \quad (2.3-3)$$

$$\begin{aligned} e_6' + \frac{e_4'''}{2^2 3!} + \frac{e_2^{(5)}}{2^4 5!} + \frac{z^{(7)}}{2^6 7!} &= f_y \left(e_6 + \frac{e_4''}{2^2 2!} + \frac{e_2^{(4)}}{2^4 4!} + \frac{z^{(6)}}{2^6 6!} \right) \\ &+ 2 \frac{1}{2!} f_{yy} \left(e_4 + \frac{e_2''}{2^2 2!} + \frac{z^{(4)}}{2^4 4!}, e_2 + \frac{z''}{2^2 2!} \right) \\ &+ \frac{1}{3!} f_{yyy} \left(e_2 + \frac{z''}{2^2 2!}, e_2 + \frac{z''}{2^2 2!}, e_2 + \frac{z''}{2^2 2!} \right) \end{aligned} \quad (2.3-4)$$

Seien nun diese Gleichungen erfüllt.

Mit der linearen Abbildung $J_{\nu,6}$, die in (2.3-9) eingeführt wird, Integralrestgliedern $s_{\nu,6}^\pm$, aus (2.3-8) sowie dem Integralrestglied $I_{\nu,6}^f$ aus der Formel (2.1-10) gilt dann folgende Rekursion für das Restglied $R_{\nu,8}$

$$\begin{aligned} R_{\nu,8} &= \left(I - \frac{h}{2} J_{\nu,6} \right)^{-1} \left(I + \frac{h}{2} J_{\nu,6} \right) [R_{\nu-1,8} + h^8 s_{\nu,6}^-] - h^8 s_{\nu,6}^+ \\ &+ \left(I - \frac{h}{2} J_{\nu,6} \right)^{-1} I_{\nu,6}^f \frac{h^9}{3!} \end{aligned} \quad (2.3-5)$$

Beweis

Wir gehen mit (2.3-1) in die IMR (1.1-8) ein, und entwickeln alle Funktionen um den Punkt $\hat{t}_\nu$ bis zur Ordnung h^7 . So ist z.B:

$$z(\hat{t}_\nu \pm \frac{h}{2}) = z(\hat{t}_\nu) \pm \frac{h}{2^1 1!} z'(\hat{t}_\nu) + \dots \pm \frac{h^7}{2^7 7!} z^{(7)}(\hat{t}_\nu) + \frac{h^8}{2^8 7!} I_\nu^\pm [6, 0]$$

⁴Wir werden ab jetzt statt $z(t), e_{2k}(t)$ nur mehr z, e_{2k} und statt $f_y(t, z(t)), f_{yy}(t, z(t))$... nur mehr $f_y, f_{yy}, \dots$ schreiben. Wenn wir statt der Funktionen die Funktionswerte am Punkt t_ν bzw. $(t_\nu, z(t_\nu))$ meinen, werden wir besonders darauf hinweisen.

und analog entwickeln wir auch für $k = 1, 2, 3$ die Funktionen e_{2k} bis h^{7-2k} , mit den Integralrestgliedern $I_\nu^\pm[6, 2k]$. Mit diesen Entwicklungen folgt aus (2.3-1) für die linke Seite der IMR (1.1-3):

$$\begin{aligned} \frac{\eta_\nu - \eta_{\nu-1}}{h} = & z' + \frac{h^2}{2^2 3!} z''' + \frac{h^4}{2^4 5!} z^{(5)} + \frac{h^6}{2^6 7!} z^{(7)} + \frac{h^8}{2^8 7!} \frac{I_\nu^+[6, 0] - I_\nu^-[6, 0]}{h} \\ & + h^2 e'_2 + \frac{h^4}{2^2 3!} e_2''' + \frac{h^6}{2^4 5!} e_4^{(5)} + \frac{h^8}{2^6 5!} \frac{I_\nu^+[6, 2] - I_\nu^-[6, 2]}{h} \\ & + h^4 e'_4 + \frac{h^6}{2^2 3!} e_4''' + \frac{h^8}{2^4 3!} \frac{I_\nu^+[6, 4] - I_\nu^-[6, 4]}{h} \\ & + h^6 e'_6 + \frac{h^8}{2^2 1!} \frac{I_\nu^+[6, 6] - I_\nu^-[6, 6]}{h} \\ & + \frac{R_{\nu,8} - R_{\nu-1,8}}{h} \end{aligned} \quad (2.3 - 6)$$

Alle Funktionen sind am Punkt $\hat{t}_\nu$ ausgewertet zu denken. Für die rechte Seite von (1.1-8) sind mehrere Entwicklungsschritte erforderlich. Deren erster ist

$$\begin{aligned} \frac{\eta_\nu + \eta_{\nu-1}}{2} = & z + \frac{h^2}{2^2 2!} z'' + \frac{h^4}{2^4 4!} z^{(4)} + \frac{h^6}{2^6 6!} z^{(6)} + \frac{h^8}{2^8 7!} \frac{I_\nu^+[6, 0] + I_\nu^-[6, 0]}{2} \\ & + h^2 e_2 + \frac{h^4}{2^2 2!} e_2'' + \frac{h^6}{2^4 4!} e_2^{(4)} + \frac{h^8}{2^6 5!} \frac{I_\nu^+[6, 2] + I_\nu^-[6, 2]}{2} \\ & + h^4 e_4 + \frac{h^6}{2^2 2!} e_4'' + \frac{h^8}{2^4 3!} \frac{I_\nu^+[6, 4] + I_\nu^-[6, 4]}{2} \\ & + h^6 e_6 + \frac{h^8}{2^2 1!} \frac{I_\nu^+[6, 6] + I_\nu^-[6, 6]}{2} \\ & + \frac{R_{\nu,8} + R_{\nu-1,8}}{2} \end{aligned} \quad (2.3 - 7)$$

Diese Formel wollen wir vereinfacht schreiben als

$$\begin{aligned} \frac{\eta_\nu + \eta_{\nu-1}}{2} = & \alpha_6(\hat{t}_\nu) + h^8 \frac{s_{\nu,6}^+ + s_{\nu,6}^-}{2} + \frac{R_{\nu,8} + R_{\nu-1,8}}{2} \\ = & z(\hat{t}_\nu) + h^2 \bar{\alpha}_6(\hat{t}_\nu) + h^8 \frac{s_{\nu,6}^+ + s_{\nu,6}^-}{2} + \frac{R_{\nu,8} + R_{\nu-1,8}}{2} \end{aligned} \quad (2.3 - 8)$$

Im zweiten Schritt entwickeln wir f bezüglich ihres zweiten Arguments um den Punkt α_6 . Wie in Kapitel 2.1 gibt es dann eine lineare Abbildung $J_{\nu,6}$, sodaß

$$f\left(\hat{t}_\nu, \frac{\eta_\nu - \eta_{\nu-1}}{2}\right) = f(\hat{t}_\nu, \alpha_6(\hat{t}_\nu)) + J_{\nu,6} \left[h^8 \frac{s_{\nu,6}^+ + s_{\nu,6}^-}{2} + \frac{R_{\nu,8} - R_{\nu-1,8}}{2} \right] \quad (2.3 - 9)$$

Als dritten Schritt entwickeln wir $f(z + h^2 \bar{\alpha}_6)$

$$\begin{aligned} f(t, z + h^2 \bar{\alpha}_6) = & f(t, z) + h^2 f_y(\bar{\alpha}_6) + \frac{h^4}{2!} f_{yy}(\bar{\alpha}_6, \bar{\alpha}_6) \\ & + \frac{h^6}{3!} f_{yyy}(\bar{\alpha}_6, \bar{\alpha}_6, \bar{\alpha}_6) + \frac{h^8}{3!} I_{\nu,6}^f \end{aligned} \quad (2.3 - 10)$$

Da $\bar{\alpha}_6$ von der Form $\phi_2 + h^2 \phi_4 + h^4 \phi_6$ ist, wie sich aus (2.3-7) und (2.3-8) ergibt, und f_y, f_{yy}, f_{yyy} (multi)lineare Abbildungen sind, können wir damit die rechte Seite der IMR

(1.1-8) nach Potenzen von h^2 ordnen. Sie lautet dann⁵:

$$\begin{aligned}
f\left(\hat{t}_\nu, \frac{\eta_\nu + \eta_{\nu-1}}{2}\right) = & f \\
& + h^2 f_y \left(\frac{e_0''}{2^2 2!} + e_2 \right) \\
& + h^4 \left[f_y \left(\frac{e_0^{(4)}}{2^4 4!} + \frac{e_2''}{2^2 2!} + e_4 \right) + \frac{1}{2!} f_{yy} \left(\frac{e_0''}{2^2 2!} + e_2, \frac{e_0''}{2^2 2!} + e_2 \right) \right] \\
& + h^6 \left[f_y \left(\sum_{k=0}^3 \frac{e_{6-2k}^{(2k)}}{2^{2k} (2k)!} \right) + 2 \frac{1}{2!} f_{yy} \left(\sum_{k=0}^2 \frac{e_{4-2k}^{(2k)}}{2^{2k} (2k)!}, \frac{e_0''}{2^2 2!} + e_2 \right) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{3!} f_{yyy} \left(\frac{e_0''}{2^2 2!} + e_2, \frac{e_0''}{2^2 2!} + e_2, \frac{e_0''}{2^2 2!} + e_2 \right) \right] \\
& + J_{\nu,6} \left(\frac{R_{\nu,8} + R_{\nu-1,8}}{2} + h^8 \frac{s_{\nu,6}^+ + s_{\nu,6}^-}{2} \right) + \frac{h^8}{3!} I_{\nu,6}^f
\end{aligned} \tag{2.3-11}$$

Koeffizientenvergleich liefert bei h^0 die Gleichung der exakten Lösung $z' = f(t, z)$, und bei h^2 bis h^6 genau die drei behaupteten Variationsgleichungen (2.3-2) bis (2.3-4). Alle noch unberücksichtigt gebliebenen Terme ergeben die Gleichung

$$\frac{R_{\nu,8} - R_{\nu-1,8}}{h} + h^8 \frac{s_{\nu,6}^+ - s_{\nu,6}^-}{h} = J_{\nu,6} \left[\frac{R_\nu + R_{\nu-1}}{2} + h^8 \frac{s_{\nu,6}^+ + s_{\nu,6}^-}{2} \right] + \frac{h^8}{3!} I_{\nu,6}^f$$

aus der – analog zur Ableitung von (2.1-7) – die behauptete Restgliedgleichung (2.3-5) folgt.

q.e.d.

Wir kennen jetzt die Gestalt der ersten drei Variationsgleichungen. Um die n-te

Variationsgleichung allgemein formulieren zu können, brauchen wir noch folgende Abkürzung:

$$\phi_{2n}(t) := \sum_{k=0}^n \frac{e_{2n-2k}^{(2k)}(t)}{2^{2k} (2k)!} \tag{2.3-12}$$

Es sind dies dieselben ϕ_{2n} , die wir weiter oben bei der Beschreibung von $\bar{\alpha}_6$ eingeführt haben.

Satz 2.3.2

Mit ϕ_{2n} aus (2.3-11) lautet die n-te Variationsgleichung

$$\begin{aligned}
e'_{2n} + \sum_{k=1}^n \frac{e_{2n-2k}^{(2k+1)}}{2^{2k} (2k+1)!} = & f_y \phi_{2n} + \frac{1}{2!} \sum_{i=1}^{n-1} f_{yy}(\phi_{2i}, \phi_{2n-2i}) \\
& + \frac{1}{3!} \sum_{i+j+k=n} f_{yyy}(\phi_{2i}, \phi_{2j}, \phi_{2k}) + \dots + \\
& + \frac{1}{n!} \frac{\partial^n f}{\partial y^n}(\phi_2, \phi_2, \dots, \phi_2)
\end{aligned} \tag{2.3-13}$$

⁵Wir schreiben z als e_0 und denken uns alle Funktionen und Operatoren an der Stelle $\hat{t}_\nu$ beziehungsweise bei $(\hat{t}_\nu, z(\hat{t}_\nu))$ ausgewertet

Beweis

Analoge Fortsetzung der Entwicklungen (2.3-6) bis (2.3-9) liefert das Gewünschte.

q.e.d.

Bemerkung 2.3.3

Die n-te Variationsgleichung ist eine lineare DGL 1. Ordnung für e_{2n} von der Form

$$e'_{2n} + i_1 = f_y e_{2n} + i_2$$

Die Größen i_1 und i_2 hängen von $e_0, e_2, \dots, e_{2n-2}$ ab. Erst wenn alle e_{2k} mit $k < n$ bekannt sind, also erst nach Lösung aller Variationsgleichungen mit niedrigerem Index, kann man die n-te Variationsgleichung lösen.

2.4 Abschätzung des Restgliedes der asymptotischen Entwicklung

Der in Abschnitt 2.3 bewiesene Satz 2.3.1 stellt eine reine Identität dar, aus der noch keinesfalls die Existenz einer asymptotischen Entwicklung des globalen Diskretisierungsfehlers der IMR folgt. Dazu wäre es noch notwendig, das Restglied abzuschätzen, d.h. aus der Restgliedgleichung (2.3-5) auf $\|R_\nu\| = O(h^8)$ zu schließen. Wenn wir die Beziehung (2.3-5), die dort für $m = 3$ hergeleitet wurde, verallgemeinern, so erhalten wir die allgemeine Restgliedgleichung.

$$R_{\nu,2m+2} = G_{\nu,2m}[R_{\nu-1,2m+2} + h^{2m+2}s_{\nu,2m}^-] - h^{2m+2}s_{\nu,2m}^+ + \frac{G_{\nu,2m} + I}{2} \frac{h^{2m+3}}{m!} I_{\nu,2m}^f \quad (2.4-1)$$

(Dabei haben wir noch die Verallgemeinerung von Definition (2.1-8) verwendet.) In diesem Abschnitt wollen wir untersuchen, unter welchen Voraussetzungen man von (2.4-1) auf $R_{\nu,2m+2} = O(h^{2m+2})$ schließen kann, und in welchen Fällen dies nicht möglich ist.

Hinreichende Bedingungen für ein $O(h^{2m+2})$ -Verhalten des Restgliedes

Auf den ersten Blick könnte man meinen, daß die Restgliedgleichung (2.4-1) ganz analog zur Rekursion (2.1-7) behandelt werden könnte. Bei der Diskussion von (2.1-7) wird aus dem h^2 -Charakter der Inhomogenität auf den h^2 -Charakter von R_ν geschlossen, und zwar sowohl für "konventionelle" Probleme mit moderater Lipschitzkonstante L (Satz 2.1.2), als auch für steife Probleme mit großer Lipschitzkonstante L aber nicht stark positiver einseitiger Lipschitzkonstante m (Satz 2.2.2). Tatsächlich kann man zu jedem einzelnen Schritt, der zum Beweis dieser Sätze nötig war, eine analoge Beziehung finden, wobei man sich allerdings jedesmal davon überzeugen muß, daß die erhaltene Beziehung richtig ist. Insbesondere gilt

$$s_{\nu,2m}^\pm = s_{2m}(\hat{t}_\nu) + h \cdot K_{\nu,2m}^\pm \quad (2.4-2)$$

Wenn es jetzt moderate Schranken für alle $e_{2k}^{(n)}$ gibt, wenn also nicht nur die Lösung des Problems $z(t)$, sondern auch die Lösungen der Variationsgleichungen $e_{2k}(t)$ glatt sind, dann gibt es auch Schranken $M_{s,2m}$ und $M_{k,2m}$ sodaß

$$\|s_{2m}(t)\| \leq M_{s,2m} \quad t \in [0, T] \quad (2.4-3)$$

$$\|K_{\nu,2m}^\pm\| \leq M_{k,2m} \quad (2.4-4)$$

und außerdem ein $M_{k,2m}^*$ mit

$$\|s_{\nu+1,2m}^- - s_{\nu,2m}^+\| \leq h \cdot M_{k,2m}^* \quad (2.4-5)$$

Wenn sich außerdem noch die $m+1$ -te Ableitung von f nach y gutartig verhält, sodaß gilt

$$\|I_{\nu,2m}^f\| \leq M_{f,2m} \quad (2.4-6)$$

dann können wir rein formal folgendes zeigen:

Satz 2.4.1

Sei $\|f_y\| \leq L$ auf einem Bereich $I \times \mathcal{B}$, genügend groß, daß die Verallgemeinerung von (2.1-10) gilt. Wenn die drei Ungleichungen (2.4-3), (2.4-4) und (2.4-6) gelten, dann folgt für das Restglied der asymptotischen Entwicklung

$$\|R_{\nu,2m+2}\| \leq e^{rLt_\nu} \|R_{0,2m+2}\| + \frac{e^{rLt_\nu} - 1}{L} \left(M_{s,2m} + M_{k,2m} + \frac{M_{f,2m}}{m!} \right) h^{2m+2} \quad (2.4 - 7)$$

ohne Beweis.

Satz 2.4.2

Sei f einseitig Lipschitz-stetig mit einem geeigneten $m \geq 0$, wieder auf $I \times \mathcal{B}$ genügend groß, und gelten die Abschätzungen (2.4-3), (2.4-5) und (2.4-6), dann folgt für das Restglied

$$\begin{aligned} \|R_{\nu,2m+2}\| &\leq e^{\tilde{r}mt_\nu} \|R_{0,2m+2}\| + \\ &+ \left[(e^{\tilde{r}mt_\nu} - 1) M_{s,2m} + \frac{e^{\tilde{r}mt_\nu} - 1}{m} \left(M_{k,2m}^* + \frac{M_{f,2m}}{m!} \right) \right] h^{2m+2} \end{aligned} \quad (2.4 - 8)$$

ohne Beweis.

Die Bedingungen (2.4-3) bis (2.4-6) sind für eine a-priori-Abschätzung des Restgliedes natürlich völlig unbrauchbar, da man, um ihre Gültigkeit nachzuweisen, alle Variationsgleichungen lösen muß. Von vornherein hat man aber nur die Problemdata zur Verfügung, nämlich das Verhalten der Funktion $f(t, y)$ und deren Ableitungen sowie das Verhalten der Lösungsfunktion $z(t)$. Nehmen wir an, $f(t, y)$ und $z(t)$ seien beide glatte Funktionen. Aus der Existenz glatter Lösungen der Variationsgleichungen folgen (2.4-3) bis (2.4-5), und, in Verbindung $f_{yy\dots y}$ klein, auch (2.4-6), denn $I_{\nu,2m}^f$ hat die Form

$$I_{\nu,2m}^f = \int_0^1 \frac{\partial^{m+1}}{\partial y^{m+1}} f(\hat{t}_\nu, z(\hat{t}_\nu) + \sigma h^2 \bar{\alpha}_{2m}(\hat{t}_\nu)) \left[\bar{\alpha}_{2m}(\hat{t}_\nu), \bar{\alpha}_{2m}(\hat{t}_\nu), \dots, \bar{\alpha}_{2m}(\hat{t}_\nu) \right] (1 - \sigma) d\sigma$$

Wir wollen jetzt untersuchen, ob die Existenz solcher glatter Lösungen schon aus den Problemdata gefolgert werden kann.

Diskussion des klassischen Falles

Die Lipschitzkonstante L ist also von moderater Größe. $e_2(t)$ ist Lösung des Anfangswertproblems

$$\begin{aligned} e_2'(t) &= f_y e_2(t) + \frac{1}{2^2 2!} f_y z''(t) - \frac{1}{2^2 3!} z'''(t) \\ e_2(0) &= 0 \end{aligned} \quad (2.4 - 9)$$

und kann mit der Lösung $\bar{e}_2(t) \equiv 0$ des Anfangswertproblems

$$\begin{aligned} \bar{e}_2'(t) &= f_y \bar{e}_2(t) \\ \bar{e}_2(0) &= 0 \end{aligned}$$

verglichen werden. Die bekannte Konditionsabschätzung für Anfangswertprobleme

$$\|e_2(t) - \bar{e}_2(t)\| \leq \frac{e^{Lt} - 1}{L} \delta$$

und

$$\left\| \frac{1}{2^2 2!} f_y z''(t) - \frac{1}{2^2 3!} z'''(t) \right\| \leq \delta := \frac{1}{2^2 2!} L M_2 + \frac{1}{2^2 3!} M_3 \quad (2.4 - 10)$$

ergibt

$$\|e_2(t)\| \leq \frac{e^{Lt} - 1}{L} \left(\frac{1}{2^2 2!} L M_2 + \frac{1}{2^2 3!} M_3 \right) \quad (2.4 - 11)$$

also das gewünschte $e_2(t) = O(1)$.

Eine Abschätzung für $e'_2(t)$ ergibt sich sofort aus (2.4-9) bis (2.4-11)

$$\|e'_2(t)\| \leq L \frac{e^{Lt} - 1}{L} \delta + \delta = e^{Lt} \left(\frac{1}{2^2 2!} L M_2 + \frac{1}{2^2 3!} M_3 \right) \quad (2.4 - 12)$$

Durch totales Differenzieren von (2.4-9) und rekursives Benützen der schon erhaltenen Abschätzungen für $e_2^{(j)}$ mit $j < i$ ergibt sich schließlich die gewünschte Aussage $e_2^{(i)}(t) = O(1)$. Analog erhält man eine Abschätzung für die $e_4^{(i)}(t)$, wobei man, da in der Variationsgleichung für die $e_4(t)$ die Größe $e_2''(t)$ vorkommt, die schon hergeleiteten Schranken für $e_2^{(i)}(t)$ rekursiv benützen muß. Man sieht also, wie man nach und nach in rekursiver Weise die Aussagen $e_{2k}^{(i)}(t) = O(1)$ beweisen kann, sofern man voraussetzt, daß $f_{tt...t yy...y} = O(1)$ gilt. (Höhere f -Ableitungen treten nicht erstmals in den späteren Variationsgleichungen auf, sondern entstehen schon beim totalen Differenzieren der 1., 2., ... Variationsgleichung) Man sieht also einen wesentlichen Unterschied zur Behandlung der Rekursion (2.1-7): Während bei der Behandlung von (2.1-7) keine Annahmen über f (außer Lipschitzstetigkeit) gemacht werden müssen, um die h^2 -Konvergenz des globalen Fehlers der IMR nachzuweisen, gelingt uns die Herleitung asymptotischer Entwicklungen nur unter Glattheitsannahmen bezüglich f , wobei die Schranken für $f_{t...t yy...y}$ sehr wohl in die Schranke für das $O(h^{2m+2})$ -Restglied R_ν eingehen.

Diskussion des steifen Falles

Jetzt ist also die Lipschitzkonstante L groß, und nur die einseitige Lipschitzkonstante m “moderately sized”. Es gibt zwar auch Konditionsabschätzungen, die auf m basieren, trotzdem läßt sich eine ähnliche rekursive Abschätzung der $e_{2k}^{(i)}$ wie im klassischen Fall *nicht* aufbauen. Einfachste Modelle (Vergleiche Kapitel 3.1) zeigen, dass höhere Ableitungen von $e_2(t)$ schon Terme der Form $\lambda^k e^{\lambda t}$ enthalten, wobei λ ein steifer Eigenwert ist. Von einer Beschränktheit der $e_{2k}^{(i)}$ unabhängig von λ und damit von L kann also nicht die Rede sein. In der Tat gibt es, wie aus der Untersuchung einfacher Modelle bekannt ist, im steifen Fall keine asymptotischen Entwicklungen der Form (2.3-1), sondern nur $O(h^2)$ -Restglieder. Eine solche kann man nur erreichen, wenn man glatte Lösungen der Variationsgleichungen findet, was mit den Anfangswerten $e_{2k}(0) = 0$ nicht möglich ist. Wollen wir andere Anfangswerte verwenden, so müssen wir entweder die Bedingung $\eta_0 = 0$ oder die Annahme $R_{0,2m+2} = 0$ fallenlassen. Ersteres wurde von [1] versucht. Wir werden im Kapitel 3 den zweiten Weg verfolgen.

Davor wollen wir aber noch mit unserem in Kapitel 2.3 hergeleiteten Apparat den Spezialfall der numerischen Quadratur behandeln.

2.5 Herleitung eines Analogons zur Euler-Mc-Laurinschen Summenformel

Darstellung der Integration als Lösung einer Differentialgleichung

Wir betrachten das Problem $y'(t) = f(t)$ mit $y(a) = 0$.

Dann ist $f(t, z(t)) = f(t)$ und daher $f_y \equiv 0$. Die Lösung dieses Problems ist natürlich:

$$z(t) = \int_a^t f(\tau) d\tau \quad t \in [a, b]$$

und damit wird

$$z(b) = \int_a^b f(t) dt \quad (2.5 - 1)$$

Wir ermitteln nun einen Näherungswert für dieses bestimmte Integral, indem wir diesmal das Intervall $[a, b]$ in n gleiche Teile teilen, und η_n durch n Mittelpunktsschritte aus $\eta_0 = 0$ berechnen. Mit $h = (b - a)/n$ gilt dann:

$$\begin{aligned} \frac{\eta_1 - 0}{h} &= f(a + \frac{1}{2}h) \\ \frac{\eta_2 - \eta_1}{h} &= f(a + \frac{3}{2}h) \\ &\vdots \\ \frac{\eta_n - \eta_{n-1}}{h} &= f(b - \frac{1}{2}h) \end{aligned}$$

ergibt in Summe

$$\frac{\eta_n - 0}{h} = \sum_{k=1}^n f(a + \frac{2k-1}{2}h) \quad (2.5 - 2)$$

Mit der Fehlerstruktur dieser numerischen Nähernug

$$\eta_n = z(b) + h^2 e_2(b) + h^4 e_4(b) + \dots + h^{2m} e_{2m}(b) + R_{n,2m+2} \quad (2.5 - 3)$$

erhalten wir

$$h \sum_{k=1}^n f(a + \frac{2k-1}{2}h) - \int_a^b f(t) dt = h^2 e_2(b) + \dots + h^{2m} e_{2m}(b) + R_{n,2m+2} \quad (2.5 - 4)$$

und erwarten uns in Analogie zu Satz 2.3.3 daß $R_{n,2m+2} = O(h^{2m+2})$.

Lösung der Variationsgleichungen bis auf Konstante

Da $f(t)$ nicht von y abhängt, nehmen die Variationsgleichungen eine einfache Form an:

$$\begin{aligned} e_2' + \frac{z'''}{2^2 3!} &= 0 \\ e_4' + \frac{e_2'''}{2^2 3!} + \frac{z^{(5)}}{2^4 5!} &= 0 \\ &\vdots \end{aligned}$$

also allgemein

$$\sum_{k=0}^m \frac{1}{2^{2k}(2k+1)!} e_{2m-2k}^{(2k+1)}(t) = 0 \quad (2.5-5)$$

als Spezialfall von (2.3-13). Die erste dieser Gleichungen liefert mit $e_2(a) = 0$:

$$e_2(t) = -\frac{z''(t) - z''(a)}{2^2 3!} = -\frac{f'(t) - f'(a)}{2^2 3!}$$

Gehen wir damit in die nächste Gleichung, erhalten wir

$$e_4(t) = \frac{c_4}{4!} [f'''(t) - f'''(a)]$$

mit einer geeigneten Konstanten c_4 . Mittels vollständiger Induktion erhalten wir allgemein:

$$e_{2k}(t) = \frac{c_{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(t) - f^{(2k-1)}(a)] \quad (2.5-6)$$

Berechnung der Konstanten c_{2k} in $e_{2k}(t)$

Die Euler-Mc-Laurinsche Summenformel liefert die Fehlerstruktur der Trapezregel als Quadraturformel. Im zu (2.5-6) äquivalenten Ausdruck stehen dort anstelle der c_{2k} die Bernoullizahlen B_{2k} . Es wird sich zeigen, daß

$$c_{2k} = \left(\frac{1}{2^{2k-1}} - 1 \right) B_{2k} \quad (2.5-7)$$

mit $B_2 = \frac{1}{6}$, $B_4 = -\frac{1}{30}$, $B_6 = \frac{1}{42}$, ... Gehen wir mit (2.5-6) in (2.5-5) so erhalten wir

$$f^{(2m)}(t) \left(\sum_{k=0}^m \frac{1}{2^{2k}(2k+1)!} \frac{c_{2m-2k}}{(2m-2k)!} \right) = 0 \quad m \geq 1$$

und daraus eine Rekursion für die c_{2i} :

$$\sum_{k=0}^m \frac{1}{2^{2k}(2k+1)!} \frac{c_{2m-2k}}{(2m-2k)!} = 0 \quad m \geq 1 \quad (2.5-8)$$

Diese Summe erinnert in ihrer Struktur stark an das Cauchyprodukt der beiden erzeugenden Funktionen

$$C(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_{2n}}{(2n)!} x^{2n} \quad \text{und} \quad \sinh(x) = \frac{x}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{x^{2m}}{2^{2m}(2m+1)!}$$

Mit (2.5-8) gilt dann

$$\left(c_0 + \frac{c_2}{2!} x^2 + \frac{c_4}{4!} x^4 + \dots \right) \frac{x}{2} \left(\frac{1}{1!} + \frac{x^2}{2^2 3!} + \frac{x^4}{2^4 5!} + \dots \right) = c_0 \frac{x}{2} = \frac{x}{2}$$

c_0 muß 1 gesetzt werden, denn aus (2.5-6) und (2.5-1) folgt

$$z(b) = e_0(b) = \frac{c_0}{0!} (F(b) - F(a)) = \frac{c_0}{0!} \int_a^b f(t) dt = \frac{c_0}{0!} z(b)$$

Wir erhalten also

$$\begin{aligned} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_{2n}}{(2n)!} x^{2n} \right) \frac{e^{\frac{x}{2}} - e^{-\frac{x}{2}}}{2} &= \frac{x}{2} \\ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_{2n}}{(2n)!} x^{2n} &= \frac{x}{e^{\frac{x}{2}} - e^{-\frac{x}{2}}} \end{aligned} \quad (2.5-9)$$

Umformung der rechten Seite ergibt

$$\begin{aligned} \frac{x}{e^{\frac{x}{2}} - e^{-\frac{x}{2}}} &= \frac{x \cdot e^{\frac{x}{2}}}{e^x - 1} = x \frac{e^{\frac{x}{2}} + 1}{e^x - 1} - \frac{x}{e^x - 1} = \\ &= 2 \left(\frac{\frac{x}{2}}{e^{\frac{x}{2}} - 1} + \frac{x}{4} \right) - \left(\frac{x}{e^x - 1} + \frac{x}{2} \right) \end{aligned} \quad (2.5-10)$$

Bekanntlich lautet die erzeugende Funktion der Bernoullizahlen

$$\sum_{n=0}^{\infty} B_{2n} \frac{x^{2n}}{(2n)!} = \frac{x}{e^x - 1} + \frac{x}{2} \quad (2.5-11)$$

Aus (2.5-10) und (2.5-11) erhalten wir

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_{2n} \frac{x^{2n}}{(2n)!} = 2 \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_{2n}}{(2n)!} \left(\frac{x}{2} \right)^{2n} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_{2n}}{(2n)!} x^{2n}$$

und durch Koeffizientenvergleich bei x^{2n} erhalten wir die behauptete Beziehung (2.5-7).

Wenn wir das Integral aus (2.5-1) mit I und den durch die Mittelpunktsregel gewonnenen Näherungswert mit ΔI bezeichnen, dann gilt also:

$$\Delta I - I = \sum_{k=1}^m \left[\frac{2^{1-2k} - 1}{(2k)!} B_{2k} \left(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \right) h^{2k} \right] + R_{n,2m+2} \quad (2.5-12)$$

und es bleibt nur noch die Ordnung von $R_{n,2m+2}$ zu studieren.

Berechnung und Abschätzung des Restgliedes

Wegen $f_y \equiv 0$ gilt, wenn wir die analoge Formel zu (2.3-5) herleiten

$$R_{\nu,2m+2} = R_{\nu-1,2m+2} + h^{2m+2} s_{\nu,2m}^- - h^{2m+2} s_{\nu,2m}^+ \quad (2.5-13)$$

weil $J_{\nu,2m}$ und $I_{\nu,2m}^f$ identisch verschwinden. Auf Grund der speziellen Gestalt der e_{2k} – siehe (2.5-6) – können wir schließen, daß sich $s_{\nu,2m}^{\pm}$ schreibt als

$$s_{\nu,2m}^{\pm} = \int_0^1 P_{2m+1}^{\pm}(\sigma) f^{(2m)} \left(\hat{t}_{\nu} \pm \frac{h}{2} \sigma \right) d\sigma$$

wobei $P_{2m+1}^{\pm}$ Polynome vom Grad $2m+1$ in σ sind. Außerdem kann man sich überlegen, daß, analog zu (2.1-16) und gemäß (2.4-2) gilt

$$s_{\nu,2m}^{\pm} = s_{2m}(\hat{t}_{\nu}) + h \int_0^1 Q_{2m+2}^{\pm}(\sigma) f^{(2m+1)} \left(\hat{t}_{\nu} \pm \frac{h}{2} \sigma \right) d\sigma \quad (2.5-14)$$

Die Polynome $Q_{2m+2}^{\pm}$ sind vom Grad $2m+2$. Wahrscheinlich sind sie bei näherer Betrachtung genauso analog zu den Bernoullipolynomen, wie unsere c_{2k} analog zu den

Bernoullizahlen B_{2k} waren. Wenn wir (2.5-14) in (2.5-13) einsetzen, hebt sich $s_{2m}(\hat{t}_\nu)$ weg. Sei

$$|Q_{2m+2}(\sigma)| \leq \frac{C}{2} \quad \sigma \in [0, 1] \quad (2.5 - 15)$$

dann ist offenbar auch

$$s_{\nu, 2m}^\pm \leq \frac{C}{2} \|f^{(2m+1)}\|_\infty$$

und aus (2.5-13) folgt

$$|R_{\nu, 2m+2}| \leq |R_{\nu-1, 2m+2}| + C \|f^{(2m+1)}\|_\infty h^{2m+3} \quad (2.5 - 16)$$

Das können wir direkt aufsummieren, und mit $h \cdot n = b - a$ sowie $R_{0, 2m+2} = 0$ ergibt sich

$$|R_{n, 2m+2}| \leq C(b - a) \|f^{(2m+1)}\|_\infty h^{2m+2} \quad (2.5 - 17)$$

Damit haben wir die Fehlerstruktur der IMR als Quadraturformel vollständig beschrieben. Die Integrale aus (2.5-14) lassen sich rücktransformieren (wobei man gerade alle h -Potenzen verbraucht) und werden dann beim Aufsummieren von (2.5-13) richtig zusammengestückt. Daher gibt es, so wie bei der Trapezregel, eine stückweise stetige Funktion $\Phi(t)$, zusammengesetzt aus Polynomen, und periodisch mit h , sodaß gilt

$$R_{n, 2m+2} = \int_a^b \Phi(t) f^{(2m+1)}(t) dt \quad (2.5 - 18)$$

Kapitel 3

Untersuchung der Fehlerstruktur der IMR bei steifen Modellgleichungen

3.1 Ein einfaches Beispiel

In diesem Kapitel betrachten wir das skalare Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} y'(t) &= \lambda (y(t) + e^{-t}) + e^{-t} \\ y(0) &= -1 \end{aligned} \tag{3.1-1}$$

Da bei diesem artifiziiellen Problem die exakte Lösung $z(t)$ bekannt ist, eignet es sich vorzüglich zum Studium des Fehlerverhaltens. Es gilt:

$$f_y \equiv \lambda \quad \text{und} \quad z(t) = -e^{-t} \tag{3.1-2}$$

In Zukunft wollen wir λ immer als betragsgroße negative Konstante verstehen. Dann ist 3.1-1 eine steife Differentialgleichung.

Ermittlung der asymptotischen Entwicklung bis zum Restglied

$R_{\nu,4}$

Mittels (3.1-2) und (2.3-2) erhalten wir als erste Variationsgleichung:

$$e_2'(t) + \frac{e^{-t}}{24} = \lambda \left(-\frac{e^{-t}}{8} + e_2(t) \right) \tag{3.1-3}$$

Mit $e_2(0) = 0$ hat diese die Lösung

$$e_2(t) = \frac{3\lambda + 1}{24(\lambda + 1)} (e^{-t} - e^{\lambda t}) \tag{3.1-4}$$

Die Funktion $e_2(t)$ ist noch $O(\lambda^0)$, aber $e_2^{(j)}$ ist für kleines t nur ein $O(\lambda^j)$. $e_2(t)$ ist also nicht glatt. Wenn wir nun mit (3.1-2) und (3.1-4) in (2.3-3) eingehen, erhalten wir als zweite Variationsgleichung:

$$e_4'(t) + \frac{3\lambda + 1}{24^2(\lambda + 1)} (-e^{-t} - \lambda^3 e^{\lambda t}) + \frac{e^{-t}}{24^5!} = \lambda \left[\frac{-e^{-t}}{24^4!} + \frac{3\lambda + 1}{24 \cdot 8(\lambda + 1)} (e^{-t} - \lambda^2 e^{\lambda t}) + e_4(t) \right] \tag{3.1-5}$$

Deren Lösung für den Anfangswert $e_4(0) = 0$ lautet

$$e_4(t) = -\frac{75\lambda^2 + 42\lambda + 7}{5760(\lambda + 1)^2}(e^{-t} - e^{\lambda t}) - \frac{(3\lambda + 1)\lambda^3}{288(\lambda + 1)}te^{\lambda t} \quad (3.1 - 6)$$

und ist daher für kleines t ein $O(\lambda^2)$. Wir haben die Anfangswerte so gewählt, daß

$$e_2(0) = e_4(0) = R_{0,4} = 0 \quad (3.1 - 7)$$

Mit diesem klassischen Zugang bekommen wir nicht-glatte Lösungen der Variationsgleichungen. Die Schranke aus Satz 2.4.2 für das Restglied ist also groß. Wir wollen jetzt studieren, wie sich das Restglied tatsächlich verhält. In einem numerischen Experiment wurde (3.1-1) auf dem Intervall $[0, 1]$ für verschiedene Werte von h und λ mit der impliziten Mittelpunktsregel (1.1-8) behandelt. Dabei konnte die Schrittweite h die Werte $2^{-1}, 2^{-2}, \dots, 2^{-16}$ und der Steifigkeitsparameter λ die Werte $-2, -10, -100, \dots, -10^8$ annehmen. Berechnet wurde das Restglied am Intervallende, also $R_{h^{-1},4}$. In den folgenden Tabellen sind die Ergebnisse auszugsweise wiedergegeben, und zwar in Tabelle 1 dividiert durch h^4 und in Tabelle 2 dividiert durch h^2 .

Tabelle 1

.	-10^1	-10^4	-10^6	-10^7	-10^8
2^{-6}	$-5,0826 \cdot 10^{-3}$	$-9,9477 \cdot 10^1$	$-5,0367 \cdot 10^2$	$-5,1115 \cdot 10^2$	$-5,1191 \cdot 10^2$
2^{-8}	$-5,0796 \cdot 10^{-3}$	$-4,7908 \cdot 10^{-3}$	$-6,3029 \cdot 10^3$	$-7,9800 \cdot 10^3$	$-8,1705 \cdot 10^3$
2^{-10}	.	$-4,7098 \cdot 10^{-3}$	$-1,9767 \cdot 10^3$	$-8,6170 \cdot 10^4$	$-1,2569 \cdot 10^5$
2^{-12}	.	$-4,7908 \cdot 10^{-3}$	$-4,7901 \cdot 10^{-3}$	$-2,5535 \cdot 10^3$	$-1,0720 \cdot 10^6$
2^{-14}	.	.	$-4,7901 \cdot 10^{-3}$	$-4,7901 \cdot 10^{-3}$	$-7,2870 \cdot 10^2$
2^{-15}	.	.	.	$-4,7901 \cdot 10^{-3}$	$-4,7901 \cdot 10^{-3}$
2^{-16}	.	.	.	.	$-4,7901 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 2

.	-10^1	-10^4	-10^6	-10^7	-10^8
2^{-4}	$-2,0034 \cdot 10^{-5}$	$-1,1281 \cdot 10^{-1}$	$-1,2484 \cdot 10^{-1}$	$-1,2496 \cdot 10^{-1}$	$-1,2497 \cdot 10^{-1}$
2^{-6}	$-1,2409 \cdot 10^{-6}$	$-2,4286 \cdot 10^{-2}$	$-1,2297 \cdot 10^{-1}$	$-1,2479 \cdot 10^{-1}$	$-1,2498 \cdot 10^{-1}$
2^{-8}	$-7,7509 \cdot 10^{-8}$	$-7,3102 \cdot 10^{-8}$	$-9,6175 \cdot 10^{-2}$	$-1,2177 \cdot 10^{-1}$	$-1,2467 \cdot 10^{-1}$
2^{-10}	.	$-4,5688 \cdot 10^{-9}$	$-1,8851 \cdot 10^{-3}$	$-8,2718 \cdot 10^{-2}$	$-1,1987 \cdot 10^{-1}$

Man beobachtet zweierlei.

Erstens: Im Fall $h|\lambda| \ll 1$, also bei genügend feiner Diskretisierung ist das Restglied 4. Ordnung am Punkt 1 ein $O(h^4)$. Je kleiner h , desto mehr strebt es gegen den Wert $-4,7901 \cdot 10^{-3} \cdot h^4$. Wie man aus (3.1-6) leicht nachrechnet, ist das wirklich $h^4 e_4(1)$ für $\lambda \rightarrow -\infty$. Es gibt also eine asymptotische Entwicklung sobald die Schrittweite genügend klein ist.

Zweitens: Im Fall $h|\lambda| \gg 1$, wenn also die Steifheit des Problems nicht durch eine feine Diskretisierung kompensiert wird, ist das Restglied nur ein $O(h^2)$, und zwar strebt es für $\lambda \rightarrow -\infty$ nach $-0,125 \cdot h^2 = h^2/8$.

Ab jetzt wollen wir annehmen, daß (3.1-1) sehr steif ist, und betrachten daher alle Größen für $\lambda \rightarrow -\infty$. Weitere Experimente, die hier nicht tabellarisch angeführt sind, ergaben daß der Anteil $-h^2/8$ auch im Restglied 6. Ordnung auftritt. Im Restglied 2. Ordnung, dem

globalen Fehler, ist der Faktor bei h^2 für große $|\lambda|$ und kleine $h \approx (e^{-1} - 1)/8$. Da aber gilt $e^{-1}/8 = e_2(1) =$ der “reguläre” Anteil, den man aus der asymptotischen Entwicklung erwarten würde, haben wir guten Grund anzunehmen, daß der Anteil $-h^2/8$ prinzipiell in jedem Restglied auftritt. Nun wissen wir aber aus dem Beweis von Satz 2.4.2 (Wir haben ihn nicht geführt, sondern auf die Analogie zu Satz 2.2.2 verwiesen) daß sich $R_{\nu,2m+2}$ schreiben läßt als $(\prod_{k=1}^{\nu} G_k) R_{0,2m+2} + C \cdot h^{2m+2}$. In unserem Fall ist

$$G_{\nu} x \approx \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \frac{1 - \frac{h}{2}\lambda}{1 + \frac{h}{2}\lambda} x = -x \quad \Rightarrow \quad \prod_1^{\nu} G_k \approx (-1)^{\nu}$$

Sollte der Beitrag $-h^2/8$ wirklich in $R_{0,2m+2}$ stehen, so müßte er sein Vorzeichen bei jedem IMR-Schritt wechseln, also oszillieren. Dies ist tatsächlich der Fall, wie ein weiteres numerisches Experiment lieferte. Das Restglied $R_{0,4}$ wurde dabei für $\lambda = -10^8$ und $h = 2^{-6}, 2^{-7}, 2^{-8}$ an den letzten 10 Stützstellen vor 1 ausgewertet, und zeigte eine fast ungedämpfte, reine Oszillation. Es scheint also eine “natürliche Wahl” von $R_{0,4}$ zu geben, verschieden von $R_{0,4} = 0$, deren Hauptterm $-h^2/8$ ist. Diese Annahme wollen wir jetzt verifizieren, indem wir $R_{\nu,4}$ explizit berechnen.

Berechnung einer Formel für $R_{\nu,4}$ im Fall $\lambda \rightarrow -\infty$

Die IMR (1.1-8), angewendet auf unser Modell (3.1-1) liefert

$$\eta_{\nu+1} = \eta_{\nu} \frac{2 + h\lambda}{2 - h\lambda} + e^{-\hat{t}_{\nu}} \frac{2h(\lambda + 1)}{2 - h\lambda} \quad (3.1 - 8)$$

Für $\lambda \rightarrow -\infty$ wird daraus

$$\eta_{\nu+1} = -\eta_{\nu} - 2e^{-(\nu+\frac{1}{2})h} \quad (3.1 - 9)$$

Wir schreiben die asymptotische Entwicklung an.

$$\eta_{\nu} = -e^{-\nu h} + h^2 \frac{3\lambda + 1}{24(\lambda + 1)} (e^{-\nu h} - e^{\lambda \nu h}) + R_{\nu,4} \quad (3.1 - 10)$$

Für den Limes $\lambda \rightarrow -\infty$ müssen wir jetzt allerdings zwei Fälle unterscheiden, denn es ist

$$\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} e^{\lambda \nu h} = \begin{cases} 1 & \nu = 0 \\ 0 & \nu > 0 \end{cases} \quad (3.1 - 11)$$

Daher wird aus (3.1-10)

$$\begin{aligned} \eta_0 &= -e^0 + R_{0,4} \\ \eta_{\nu} &= -e^{-\nu h} + \frac{h^2}{8} e^{-\nu h} + R_{\nu,4} \quad \nu > 0 \end{aligned} \quad (3.1 - 12)$$

Einsetzen von (3.1-12) in (3.1-9) ergibt

$$\begin{aligned} R_{\nu+1,4} &= -R_{\nu,4} + e^{-(\nu+\frac{1}{2})h} \left(e^{-\frac{h}{2}} - 2 + e^{\frac{h}{2}} - \frac{h^2}{8} (e^{-\frac{h}{2}} + e^{\frac{h}{2}}) \right) \\ &= -R_{\nu,4} + e^{-\hat{t}_{\nu}} O(h^4) \quad \text{wenn } \nu > 0 \end{aligned} \quad (3.1 - 13)$$

$$R_{1,4} = -R_{0,4} + e^{-\frac{h}{2}} \left(e^{-\frac{h}{2}} - 2 + e^{\frac{h}{2}} - \frac{h^2}{8} (e^{-\frac{h}{2}} + e^{\frac{h}{2}}) \right) + \frac{h^2}{8} \quad (3.1 - 14)$$

$R_{\nu+1,4} + R_{\nu,4}$ ist also $O(h^4)$ für alle $\nu > 0$. Aus (3.1-14) erhalten wir mit unserer Wahl der Anfangswerte (3.1-7), daß $R_{1,4} = h^2/8 + O(h^4)$. Aus (3.1-13) folgt aber, daß damit alle $R_{\nu,4}$ nur $O(h^2)$ sind. Die explizite Formel lautet, (für $\nu > 0$):

$$R_{\nu,4} = \left(1 - 2e^{-\frac{h}{2}} + e^{-h} - \frac{h^2}{8}(1 + e^{-h})\right) \frac{e^{-\nu h} - (-1)^\nu}{1 + e^{-h}} - (-1)^\nu \frac{h^2}{8} = (-1)^{\nu+1} \frac{h^2}{8} + O(h^4) \quad (3.1-15)$$

Aufsuchen von glatten $\bar{e}_{2k}$ und Diskussion der Ergebnisse

Bei Start auf der glatten Lösung $\eta_0 = z(0)$ und mit den $e_{2k}(0)$ aus (3.1-7) bekommen wir nach (3.1-15) ein mit $\pm h^2/8$ oszillierendes Restglied. Wenn wir (3.1-7) fallen lassen, können wir hingegen glatte Lösungen der Variationsgleichungen finden. Sie lauten:

$$\bar{e}_2(t) = \frac{3\lambda + 1}{24(\lambda + 1)} e^{-t} = \left(\frac{1}{8} - \frac{1}{12(\lambda + 1)} e^{-t}\right) \quad (3.1-16)$$

$$\bar{e}_4(t) = -\frac{75\lambda^2 + 42\lambda + 7}{5760(\lambda + 1)^2} e^{-t} \quad (3.1-17)$$

Da wir an $\eta_0 = z(0)$ festhalten, muß gelten

$$\bar{R}_{0,4} = -\frac{3\lambda + 1}{24(\lambda + 1)} h^2 \approx -\frac{h^2}{8} \quad (3.1-18)$$

Als Rekursion für $\bar{R}_{\nu,4}$ erhalten wir wieder (3.1-13), nur gilt sie jetzt auch für $\nu = 0$. Ebenso gilt für $\bar{R}_{\nu,4}$ die Formel (3.1-15), die jetzt auch $R_{0,4}$ richtig beschreibt. Daß $R_{\nu,4}$ und $\bar{R}_{\nu,4}$ für $\nu > 0$ identisch sind, ist leicht einzusehen, wenn man bedenkt, daß

$$\eta_\nu = z(\hat{t}_\nu) + e_2(\hat{t}_\nu) + R_{\nu,4} = z(\hat{t}_\nu) + \bar{e}_2(\hat{t}_\nu) + \bar{R}_{\nu,4}$$

und

$$\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} e_2(t) = \frac{e^{-t}}{8} = \bar{e}_2(t) \quad \forall t > 0$$

Wir haben gesehen, daß $R_{0,4} = 0$ nicht-glatte Lösungen der 1. Variationsgleichung nach sich zieht. Das nicht-glatte $e_2(t)$ "verschlechtert" die Rekursion des Restgliedes derart, daß schon $R_{1,4}$ genauso groß ist wie $\bar{R}_{1,4}$, welches dem glatten $\bar{e}_2(t)$ entspricht. In jedem Fall tritt jedoch ein oszillierender Term im Restglied auf, *der eine asymptotische Entwicklung unmöglich macht*. Es erscheint sinnvoll, den oszillierenden Beitrag gleich als $(-1)^\nu R_{0,4}$ zu denken, dann gibt es immerhin eine glatte Lösung der 1. Variationsgleichung.

Die eben erarbeiteten Überlegungen lassen sich auch auf Restglieder höherer Ordnung verallgemeinern. Beispielsweise ergibt sich mit den glatten $\bar{e}_2, \bar{e}_4$ aus (3.1-16) und (3.1-17) für das Restglied 6. Stufe

$$\bar{R}_{0,6} \approx -\frac{h^2}{8} + \frac{5}{384} h^4 \quad \lambda \ll -1 \quad (3.1-19)$$

Man sieht übrigens, daß die glatten $\bar{e}_{2k}(t)$ genau die "rein partikulären" Lösungen der Variationsgleichungen und daher *eindeutig bestimmt sind*. $\bar{e}_{2k}(t)$ kann darüber hinaus nur dann glatt gewählt werden, wenn auch alle $\bar{e}_{2j}(t)$ mit $j < k$ glatte Funktionen sind. Sobald irgendwo ein Term $e^{\lambda t}$ auftritt, ist Glattheit nicht mehr möglich.

Von [1] wurde vorgeschlagen, $\eta_0 \neq z(0)$ so zu wählen, daß möglichst viele e_{2k} glatt werden. Dieser optimale Startwert muss in unserem Modell natürlich

$$\bar{\eta}_0 = h^2 \bar{e}_2(0) + h^4 \bar{e}_4(0) + \dots + h^{2m} \bar{e}_{2m}(0)$$

sein, denn dann gilt $R_{0,2m+2} = 0$, woraus $R_{\nu,2m+2} = O(h^{2m+2})$ folgt. Offensichtlich ist $\bar{\eta}_0 + O(h^{2m+2})$ der einzige Startbereich, der ein $O(h^{2m+2})$ -Verhalten des Restgliedes $R_{\nu,2m+2}$ und damit eine asymptotische Entwicklung bis zur Ordnung h^{2m} liefert.

3.2 Das skalare Prothero-Robinson-Modell:

$$y' = \lambda(y - z(t)) + z'(t)$$

Wir wollen nun das Beispiel aus dem vorigen Kapitel verallgemeinern. Sei $z(t)$ eine beliebige glatte Funktion auf $I \supset [0, T]$. Dann betrachten wir folgendes Anfangswertproblem:

$$\begin{aligned} y'(t) &= \lambda(y(t) - z(t)) + z'(t) \\ y(0) &= z(0) \end{aligned} \tag{3.2-1}$$

Wie man sich leicht überlegt, läßt sich jedes eindimensionale, lineare Anfangswertproblem als ein solches “Prothero-Robinson-Modell” darstellen. Die Konstante λ soll wieder negativ und betragsgroß sein, in diesem Kapitel verwenden wir aber keine Näherungen für $\lambda \rightarrow -\infty$, sondern exakte Formeln in Potenzen von $1/\lambda$.

Ermittlung von $e_2(t)$ und $e_4(t)$ für klassische Anfangswerte

Die ersten Variationsgleichungen lauten – vgl. (2.3-2) und (2.3-3):

$$e_2'(t) + \frac{z'''(t)}{2^2 3!} = \lambda \left(\frac{z''(t)}{2^2 2!} + e_2(t) \right) \tag{3.2-2}$$

$$e_4'(t) + \frac{e_2'''(t)}{2^2 3!} + \frac{z^{(5)}(t)}{2^4 5!} = \lambda \left(\frac{z^{(4)}(t)}{2^4 4!} + \frac{e_2''(t)}{2^2 2!} + e_4(t) \right) \tag{3.2-3}$$

Da sie offenbar die allgemeine Form

$$e_{2k}'(t) - \lambda e_{2k}(t) = i(t) \tag{3.2-4}$$

mit einer von $e_{2k-2}, e_{2k-4}, \dots, e_0$ abhängigen Inhomogenität $i(t)$ haben, definieren wir

$$(Hy)(t) := e^{\lambda t} \int_0^t e^{-\lambda \tau} y(\tau) d\tau \tag{3.2-5}$$

Lemma 3.2.1

Der Operator H ist linear und besitzt folgende Eigenschaften:

$$Hy(0) = 0 \tag{3.2-6a}$$

$$(Hy(t))' = \lambda Hy(t) + y(t) \tag{3.2-6b}$$

$$|Hy(t)| < \frac{1}{|\lambda|} \max_{\tau \in [0, t]} |y(\tau)| \tag{3.2-6c}$$

$$\lambda Hy(t) = e^{\lambda t} y(0) - y(t) + Hy'(t) \tag{3.2-6d}$$

$$(Hy(t))' = e^{\lambda t} y(0) + Hy'(t) \tag{3.2-6e}$$

$$(Hy(t))^{(n)} = e^{\lambda t} \sum_{k=1}^n \lambda^{n-k} y^{(k-1)}(0) + Hy^{(n)}(t) \tag{3.2-6f}$$

Beweis

a) trivial

b) durch Ausdifferenzieren

c) Es gilt:

$$\begin{aligned} \left| e^{\lambda t} \int_0^t e^{-\lambda \tau} y(\tau) d\tau \right| &\leq e^{\lambda t} \max_{\tau \in [0, t]} |y(\tau)| \int_0^t e^{-\lambda \tau} d\tau \\ &= e^{\lambda t} \max_{\tau \in [0, t]} |y(\tau)| \left(-\frac{1}{\lambda} \right) \left| e^{-\lambda t} - 1 \right| \\ &< \frac{1}{|\lambda|} \max_{\tau \in [0, t]} |y(\tau)| \end{aligned}$$

d) durch partielle Integration von Hy

e) aus b) und d)

f) aus e) mittels vollständiger Induktion

Die Linearität von H folgt aus der Linearität des Integrals.

q.e.d.

Mit diesem Operator lautet die Lösung von (3.2-4)

$$e_{2k}(t) = Hi(t) + e_{2k}(0)e^{\lambda t} \quad (3.2-7)$$

wie man sich durch Einsetzen leicht überzeugt. Da die Inhomogenität $i(t)$ in (3.2-4) letzten Endes nur von $z(t)$ abhängt, liegt noch folgende Abkürzung nahe:

$$z_n(t) := Hz^{(n)}(t) \quad (3.2-8)$$

Vorerst verwenden wir wieder die klassischen Anfangswerte $e_{2k}(0) = 0$. Wegen (3.2-7), Lemma 3.2.1 und (3.2-8) lautet dann die Lösung der 1. Variationsgleichung:

$$e_2(t) = \frac{\lambda}{8} z_2(t) - \frac{1}{24} z_3(t)$$

Wir wenden (3.2-6d) an, um $z_2(t)$ zu eliminieren.

$$e_2(t) = e^{\lambda t} \frac{z''(0)}{8} - \frac{z''(t)}{8} + \frac{z_3(t)}{12} \quad (3.2-9)$$

Anwendung von (3.2-6f) liefert für die Ableitungen von $e_2(t)$

$$e_2^{(j)} = \frac{1}{12} z_{j+3}(t) - \frac{1}{8} z^{(j+2)}(t) + e^{\lambda t} \left[\frac{\lambda^j}{8} z''(0) + \frac{1}{12} \sum_{i=1}^j \lambda^{j-i} z^{(i+2)}(0) \right] \quad (3.2-10)$$

Für $z''(0) \neq 0$ gilt also $e_2^{(j)}(t) = e^{\lambda t} O(\lambda^j)$. Mit (3.2-10) und (3.2-3) können wir jetzt die zweite Variationsgleichung anschreiben

$$e_4'(t) - \lambda e_4(t) = C_1 z_6(t) + C_2 z^{(5)}(t) + \lambda C_3 z^{(4)}(t) + e^{\lambda t} \left[\frac{\lambda^3}{96} z''(0) + P_2(\lambda) \right] \quad (3.2-11)$$

(wobei die C_i Konstante und $P_i(\lambda)$ ein Polynom i-ten Grades in λ mit konstanten Koeffizienten ist) und mit (3.2-7) lösen.

$$e_4(t) = C_1 H z_6(t) + (C_2 + C_3) z_5(t) + C_3 \left[e^{\lambda t} z^{(4)}(0) - z^{(4)}(t) \right] + t e^{\lambda t} \left[\frac{\lambda^3}{96} z''(0) + P_2(\lambda) \right] \quad (3.2-12)$$

(Wir haben $\lambda H z^{(4)}$ mit (3.2-6d) umgeformt.) Das bedeutet

$$e_4(t) = \lambda^2 \frac{z''(0)}{96} (t\lambda) e^{\lambda t} + O(\lambda(t\lambda) e^{\lambda t})$$

Aufsuchen glatter Lösungen

Im vorigen Kapitel gab es eine eindeutig bestimmte glatte Lösung für $e_2(t)$, nämlich jene, die überhaupt keinen Anteil der homogenen Lösung $e^{\lambda t}$ enthielt. Auch in unserem Prothero-Robinson-Modell ist die homogene Lösung $Ce^{\lambda t}$. Einen Term dieser Form haben wir bereits in (3.2-9) abgespalten. Wenn wir jetzt fortfahren, (3.2-6d) anzuwenden, erhalten wir

$$e_2(t) = -\frac{z''(t)}{8} - \frac{z'''(t)}{12\lambda} + \frac{z_4(t)}{12\lambda} + e^{\lambda t} \left(\frac{z''(0)}{8} + \frac{z'''(0)}{12\lambda} \right) = \bar{e}_2(t) + e^{\lambda t} \left(\frac{z''(0)}{8} + \frac{z'''(0)}{12\lambda} \right)$$

also ein um eine λ -Potenz glatteres $\bar{e}_2(t)$. Wenn wir nun annehmen, dass $z(t)$ eine analytische Funktion ist, dann können wir (3.2-6d) beliebig oft anwenden, und erhalten als Grenzwert einer Funktionenreihe die eindeutig bestimmte glatte Lösung der 1. Variationsgleichung:

$$\bar{e}_2(t) = -\frac{z''(t)}{8} - \frac{1}{12} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^{(k+2)}(t)}{\lambda^k} \quad (3.2-13)$$

(Wenn wir $z(t) = -e^{-t}$ setzen, wie im Beispiel des vorigen Kapitels, geht (3.2-13) in (3.1-16) über.) Man sieht sofort, dass aus der Analytizität von $z(t)$ und $\lambda < -1$ die gleichmäßige Konvergenz der Funktionenreihe auf $[0, T]$ folgt. $\lambda \geq -1$ würde bedeuten, dass es sich nicht um eine steife Differentialgleichung handelt. Analytizität von $z(t)$ ist hingegen eine sehr starke Voraussetzung. In der Praxis werden wir uns meist mit

$$\hat{e}_2(t) = -\frac{z''(t)}{8} - \frac{1}{12} \sum_{j=3}^k \frac{z^{(j)}(t)}{\lambda^{j-2}} + \frac{z_{k+1}}{12\lambda^{k-1}} \quad (3.2-14)$$

begnügen müssen. In diesem Kapitel wollen wir hingegen weiterhin annehmen, dass $z(t)$ analytisch auf $I \supset [0, t]$. Durch wiederholte Anwendung von (3.2-6d) und Weglassung der Terme $Ce^{\lambda t}$ erhalten wir dann

$$z_n(t) \sim -\frac{1}{\lambda} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{(n+k)}(t)}{\lambda^k} \quad (3.2-15)$$

wobei $f(t) \sim g(t)$ bedeuten soll, dass $f(t) = g(t) + Ce^{\lambda t}$ und $g(t)$ glatt ist. Offensichtlich ist es genauso wie im vorigen Kapitel unerlässlich, mit dem glatten $\bar{e}_2(t)$ in die 2. Variationsgleichung einzugehen, wenn man ein glattes $\bar{e}_4(t)$ bekommen will. Einsetzen von (3.2-13) in (3.2-3) ergibt

$$\begin{aligned} e'_4 - \lambda e_4 &= \lambda \frac{z^{(4)}}{2^4 4!} - \frac{z^{(5)}}{2^4 5!} \\ &+ \frac{\lambda}{8} \left(-\frac{z^{(4)}}{8} - \frac{1}{12} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^{(k+4)}}{\lambda^k} \right) \\ &- \frac{1}{24} \left(-\frac{z^{(5)}}{8} - \frac{1}{12} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^{(k+5)}}{\lambda^k} \right) \end{aligned}$$

Zusammengefasst ergibt das

$$e'_4 - \lambda e_4 = -\frac{5}{384} \lambda z^{(4)} - \frac{11}{1920} z^{(5)} - \frac{1}{144} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^{(5+k)}}{\lambda^k}$$

und mittels (3.2-7) erhalten wir

$$e_4 = -\frac{5}{384} \lambda z_4 - \frac{11}{1920} z_5 - \frac{1}{144} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z_{5+k}}{\lambda^k}$$

Um jetzt die glatte Lösung $\bar{e}_4$ zu finden, wenden wir (3.2-15) an

$$\begin{aligned}\bar{e}_4 = & \frac{5}{384} z^{(4)} + \frac{5}{384} \frac{z^{(5)}}{\lambda} + \frac{5}{384} \frac{z^{(6)}}{\lambda^2} + \frac{5}{384} \frac{z^{(7)}}{\lambda^3} + \dots \\ & + \frac{11}{1920} \frac{z^{(5)}}{\lambda} + \frac{11}{1920} \frac{z^{(6)}}{\lambda^2} + \frac{11}{1920} \frac{z^{(7)}}{\lambda^3} + \dots \\ & + \frac{1}{144} \frac{z^{(6)}}{\lambda^2} + \frac{1}{144} \frac{z^{(7)}}{\lambda^3} + \dots \\ & + \frac{1}{144} \frac{z^{(7)}}{\lambda^3} + \dots \\ & \vdots\end{aligned}$$

Zusammenfassung liefert

$$\bar{e}_4(t) = \frac{5}{384} z^{(4)}(t) + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{3}{160} + \frac{k}{144} \right) \frac{z^{(5+k)}(t)}{\lambda^{k+1}} \quad (3.2-16)$$

Auch hier genügt Analytizität von $z(t)$ und $\lambda < -1$ für die gleichmäßige Konvergenz auf $[0, T]$. Die Formel (3.1-17) aus dem vorigen Kapitel kann wieder gewonnen werden, indem man $z(t) = -e^{-t}$ in (3.2-16) einsetzt. Offenbar kann dieses Verfahren fortsetzen, mit (3.2-13) und (3.2-16) in die 3. Variationsgleichung einsetzen, mit (3.2-15) das glatte $\bar{e}_6$ gewinnen, und so fort. Wie man sich aufgrund der speziellen Gestalt der $\bar{e}_{2k}(t)$ und der Variationsgleichungen leicht überlegt, werden dabei nur Terme der Form $\lambda^{-j} z^{(2k+j)}(t)$ auftreten.

Satz 3.2.1

Sei $z(t)$ analytisch und $\lambda \ll -1$. Dann gibt es für das eindimensionale Prothero-Robinson-Modell (3.2-1) genau einen Satz von glatten $\bar{e}_{2k}$.

$$\bar{e}_{2k}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n,k} \frac{z^{(2k+n)}(t)}{\lambda^n} \quad \text{wobei} \quad a_{n,k} = O(n^{k-1})$$

Beweis

Vollständige Induktion liefert das Gewünschte.

q.e.d.

Das Restglied bei Verwendung möglichst glatter $\bar{e}_{2k}(t)$

In unserem skalaren Prothero-Robinson-Modell gilt

$$J_{\nu,2m} \equiv \lambda \quad \Rightarrow \quad G_{\nu,2m} \equiv \frac{1 + \frac{h}{2}\lambda}{1 - \frac{h}{2}\lambda} := \tilde{\gamma} \quad (3.2-17)$$

und außerdem ist natürlich $I_{\nu,2m}^f \equiv 0$. Damit lautet die Restgliedgleichung (2.4-1)

$$R_{\nu,2m+2} = \tilde{\gamma} \left(R_{\nu-1,2m+2} + h^{2m+2} s_{\nu,2m}^- \right) - h^{2m+2} s_{\nu,2m}^+ \quad (3.2-18)$$

Im Unterschied zu Abschnitt 2 gilt jetzt $|\tilde{\gamma}| < 1$. Außerdem strebt $\tilde{\gamma} \rightarrow -1$ wenn $\lambda \rightarrow -\infty$. Um zu garantieren, dass die Voraussetzungen von Satz 2.4.2 erfüllt sind, genügt, dass gilt

$e_{2k}^{(2m+3-2k)} = O((t\lambda)^i e^{\lambda t})$ für $k = 0, 1, \dots, m$, wobei i jeweils eine beliebige natürliche Zahl sein kann. Dann gilt schon

$$R_{\nu, 2m+2} = \tilde{\gamma}^\nu R_{0, 2m+2} + O(h^{2m+2}) \quad (3.2 - 19)$$

wobei $R_{0, 2m+2}$ bestimmt ist durch

$$R_{\nu, 2m+2} = - \sum_{k=1}^m h^{2k} e_{2k}(0) \quad (3.2 - 20)$$

Unter der Voraussetzung, dass $z(t)$ analytisch ist, können wir den Grenzübergang $m \rightarrow \infty$ durchführen.

Satz 3.2.2

Sei $z(t)$ analytisch und für die $\bar{e}_{2k}(t)$ aus Satz 3.2.1 existiere der Limes von (3.2-20) für $m \rightarrow \infty$. Dann lässt sich der globale Fehler des eindimensionalen Prothero-Robinson-Modells vollständig in einen regulären und einen oszillierenden Term zerlegen.

$$\eta_\nu - z(t_\nu) = \sum_{k=1}^{\infty} h^{2k} \bar{e}_{2k}(t_\nu) - \tilde{\gamma}^\nu \sum_{k=1}^{\infty} h^{2k} \bar{e}_{2k}(0) \quad (3.2 - 21)$$

Beweis

Grenzübergang $m \rightarrow \infty$ in (3.2-19) und (3.2-20).

q.e.d.

Bemerkung 3.2.3

Da $|\tilde{\gamma}| < 1$ ist, klingt der oszillierende Anteil ab, allerdings umso langsamer, je steifer das Problem ist. Dies stellt einen wesentlichen Unterschied zum impliziten Eulerverfahren dar.

Beispiel 3.2.4

Ist $z(t)$ ein Polynom vom Grad r , so gilt, wie aus Satz 3.2.1 leicht folgt, $\bar{e}_{2k}(t) \equiv 0$ für alle $k > r/2$. Die beiden Reihen in (3.2-21) haben also nur endlich viele Summanden. Zum Beispiel ergibt sich für $z(t) = t^2$ aus (3.2-14), dass $e_2 \equiv -1/4$. (3.2-21) liefert daher

$$\eta_\nu = \tilde{t}_\nu^2 + (\tilde{\gamma} - 1) \frac{h^2}{4}$$

und man überzeugt sich leicht, dass dieses η_ν (1.1-8) erfüllt. *Bemerkung 3.2.5*

Ist $z(t)$ nur endlich oft differenzierbar, so gilt statt (3.2-21) natürlich nur

$$\eta_\nu - z(t_\nu) = \sum_{k=1}^m h^{2k} \bar{e}_{2k}(t_\nu) - \tilde{\gamma}^\nu \sum_{k=1}^m h^{2k} \bar{e}_{2k}(0) + O(h^{2m+2}) \quad (3.2 - 22)$$

3.3 Ausblick auf den allgemeinen Fall

Sobald man auf allgemeinere Modelle übergeht, wird es sehr schwierig, explizite Formeln wie (3.2-13) und (3.2-16) zu gewinnen. Es gelingt noch eine Verallgemeinerung auf den mehrdimensionalen Fall $y' = Ay + g(t) = A(y - z(t)) + z'(t)$ mit einer konstanten Matrix A , wobei nach Ersetzung von $1/\lambda$ durch A^{-1} (3.2-13) und (3.2-16) ihre Gültigkeit erhalten, wie man durch direktes Einsetzen in die Variationsgleichungen sieht. Sobald man aber zu

von t abhängigen Matrizen übergeht, bricht die Argumentation völlig zusammen, da die Matrizenmultiplikation nicht mehr kommutativ ist.

Trotzdem ist es sinnvoll, das Konzept der Entwicklung der e_{2k} nach Potenzen von $1/\lambda$ beizubehalten. Ab jetzt wollen wir aber $-1/\lambda = \epsilon$ setzen, und unter ϵ eine kleine positive Konstante verstehen. Wenn man die Gestalt der Formeln (3.2-13) und (3.2-16) betrachtet, so könnte man auf den Gedanken verfallen, sie direkt aus den Variationsgleichungen, durch den Ansatz

$$e_{2k}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n f_{k,n}(t) \quad (3.3-1)$$

zu gewinnen. In der Tat führt dies bei analytischem $z(t)$, also bei unendlichen und konvergenten Reihen, sofort auf (3.2-13) und (3.1-16). Bei nur endlich oft differenzierbarem $z(t)$ muss man im Ansatz eine endliche Reihe verwenden

$$e_{2k}(t) = \sum_{n=0}^N \epsilon^n f_{k,n}(t) + \epsilon^{N+1} f_{k,N+1}(t, \epsilon) \quad (3.3-2)$$

wobei als letztes Glied eine Funktion stehen muss, die auch von ϵ abhängt. Nach Lösung der Differentialgleichung für $f_{k,N+1}$ mittels (3.2-7) erhält man genau (3.2-14).

Wir haben also guten Grund, einen Ansatz dieser Art auch dort zu versuchen, wo wir die entstehenden Differentialgleichungen nicht mehr explizit lösen, sondern bestenfalls die Größenordnung der Lösungen abschätzen können.

Das lineare skalare Anfangswertproblem mit variablen Koeffizienten

Ein Beispiel, in dem man zumindest bei der 1. Variationsgleichung die auftretenden Differentialgleichungen noch lösen kann, ist das eindimensionale lineare, aber t -abhängige Anfangswertproblem:

$$\begin{aligned} y'(t) &= -\frac{1}{\epsilon} f(t)y(t) + g(t) & f(t) > 0 \\ y(0) &= y_0 \end{aligned} \quad (3.3-3)$$

Sei $z(t)$ die Lösung des Anfangswertproblems (3.3-3); da dann gilt

$$z'(t) = -\frac{1}{\epsilon} f(t)z(t) + g(t)$$

lässt sich die Differentialgleichung von (3.3-3) auch in der Form

$$y'(t) = -\frac{f(t)}{\epsilon} (y(t) - z(t)) - z'(t) \quad (3.3-4)$$

schreiben. Die erste Variationsgleichung lautet

$$e_2'(t) + \frac{z'''(t)}{24} = -\frac{f(t)}{\epsilon} \left(\frac{z''(t)}{8} + e_2(t) \right) \quad (3.3-5)$$

Nehmen wir wieder an, dass $z(t)$ analytisch sei, dann können wir für die glatte Lösung $\bar{e}_2(t)$ den Ansatz (3.3-1) verwenden.

$$\bar{e}_2(t) = x_0(t) + \epsilon x_1(t) + \epsilon^2 x_2(t) + \dots \quad (3.3-6)$$

Wir gehen damit in (3.3-5) ein und erhalten, wenn wir nach Potenzen von ϵ ordnen und Koeffizientenvergleich machen:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{z''(t)}{8} + x_0(t) \\ x_0'(t) + \frac{z'''(t)}{24} &= -f(t) \cdot x_1(t) \\ x_1'(t) &= -f(t) \cdot x_2(t) \\ x_2'(t) &= -f(t) \cdot x_3(t) \\ &\vdots \end{aligned} \quad (3.3-7)$$

Wir erhalten keine Differentialgleichungen. Es gibt daher auch hier nur ein einziges vollständig glattes $\bar{e}_2(t)$, nämlich

$$\bar{e}_2(t) = -\frac{z''(t)}{8} + \frac{\epsilon}{12} \left[\frac{z'''(t)}{f(t)} - \epsilon \left(\frac{z'''(t)}{f(t)} \right)' \frac{1}{f(t)} + \epsilon^2 \left(\left(\frac{z'''(t)}{f(t)} \right)' \frac{1}{f(t)} \right)' \frac{1}{f(t)} + \dots \right] \quad (3.3-8)$$

In solchen Fällen, wo $f(t)$ glatt ist, kann man auch bei dieser Funktionenreihe auf Konvergenz hoffen. Man erkennt übrigens sofort, dass die Spezialisierung $f(t) \equiv 1$ wieder auf (3.2-13) führt.

In der Praxis wird man nur mit (3.3-2) ansetzen können. Man erhält dann für $x_{k+1}(t, \epsilon)$ eine echte Differentialgleichung, und begnügt sich mit dem Nachweis, dass $\epsilon \|x_{N+1}(t)\|_\infty = O(1)$.

$$\epsilon x'_{N+1}(t, \epsilon) = -f(t) \cdot x_{N+1}(t, \epsilon) - x'_N(t) \quad (3.3-9)$$

$$\epsilon x_{N+1}(t, \epsilon) = - \int_0^t e^{\frac{F(s)-F(t)}{\epsilon}} x'_N(s) ds + \epsilon x_{N+1}(0) e^{-\frac{F(t)}{\epsilon}} \quad (3.3-10)$$

$F(t)$ ist eine Stammfunktion von $f(t)$. Da im steifen Fall $f(t) > 0$ gelten muss, wächst $F(t)$ monoton, und die geforderte Abschätzung ergibt sich leicht.

Behandlung des allgemeinen Falles mit dem Ansatz aus der singulären Störungstheorie und Nachweis der Existenz glatter Lösungen der Variationsgleichungen

Als Beispiel für den allgemeinen Fall wollen wir annehmen, dass

$$f(t, z) : I \times \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}^2 \quad (3.3-11)$$

Die allgemeine Form der 1. Variationsgleichung ist nach (2.3-2)

$$e_2'(t) + \frac{z'''(t)}{24} = f_y(t, z(t)) \left(e_2(t) + \frac{z''(t)}{8} \right)$$

Wegen (3.3-11) gilt also

$$e_2(t) \in \mathbb{R}^2 \quad \text{und} \quad f_y(t, z(t)) = A(t) \quad (3.3-12)$$

Wir fordern von der 2×2 -Matrix $A(t)$, dass

$$A(t) = T(t)\Lambda(t)T^{-1}(t) \quad \Lambda(t) = \begin{pmatrix} c_1(t) & 0 \\ 0 & -\frac{c_2(t)}{\epsilon} \end{pmatrix} \quad (3.3-13)$$

wobei gelten soll $T(t), T^{-1}(t), T'(t)$ glatt. Wir wollen also den Fall betrachten, dass die Eigenwerte gut separiert liegen. Wenn wir mit (3.3-13) und dem Ansatz

$$T^{-1}(t)e_2(t) = e(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} \quad (3.3 - 14)$$

in die erste Variationsgleichung eingehen, erhalten wir nach einigen Umformungen folgendes Gleichungssystem

$$\begin{aligned} x'(t) &= (c_1(t) + a_{11}(t))x(t) + a_{12}(t)y(t) + i_1(t) \\ \epsilon y'(t) &= -c_2(t)y(t) + \epsilon a_{21}(t)x(t) + \epsilon a_{22}(t)y(t) + i_2(t) \end{aligned} \quad (3.3 - 15)$$

mit glatten Funktionen $a_{ij}(t), c_k(t), i_k(t)$. Gemäß der singulären Störungstheorie müssten wir jetzt – siehe [3] – einen Ansatz der Form

$$\begin{aligned} x(t) &= \sum \epsilon^k X_k(t) + \sum \epsilon^k(t) m_k \left(\frac{t}{\epsilon} \right) \\ y(t) &= \sum \epsilon^k Y_k(t) + \sum \epsilon^k(t) n_k \left(\frac{t}{\epsilon} \right) \end{aligned}$$

machen. Wenn man mit diesem Ansatz rechnet, erkennt man aber, dass sich mit $\tau = \frac{t}{\epsilon}$ für $m_i(\tau), n_i(\tau)$ gerade Terme der Form $e^{-C\tau}P(\tau)$ ergeben, mit einer Konstanten C und einem Polynom $P(\tau)$ mit konstanten Koeffizienten. Wie wir in unseren Modellen gesehen haben, sind das aber erstens genau die Terme, die die Glattheit zerstören, und zweitens treten sie nur deswegen auf, damit ein gewisser Anfangswert erfüllt werden kann. Tatsächlich sind in den Differentialgleichungen, die sich aus obigem Ansatz ergeben, $m_i(\tau) \equiv n_i(\tau) \equiv 0$ Lösungen. Wenn wir die Bedingung $e_2(0) = 0$ fallen lassen, genügt uns also ein Ansatz der Form (3.3-2). Dieser Ansatz liefert uns dann folgende Gleichungssysteme:

$$\begin{aligned} X_0'(t) &= (c_1(t) + a_{11}(t))X_0(t) + a_{12}(t)Y_0(t) + i_1(t) \\ 0 &= -c_2(t)Y_0(t) + i_2(t) \end{aligned} \quad (3.3 - 16)$$

$$\begin{aligned} X_1'(t) &= (c_1(t) + a_{11}(t))X_1(t) + a_{12}(t)Y_1(t) \\ Y_0'(t) &= -c_2(t)Y_1(t) + a_{21}(t)X_0(t) + a_{22}(t)Y_0(t) \end{aligned} \quad (3.3 - 17)$$

Alle weiteren Gleichungen sehen genauso aus wie (3.3-17). Wieder beobachten wir, dass wir für die $Y_k(t)$ keine Differentialgleichungen bekommen. Für die steife Komponente $y(t)$ ist die glatte Lösung also wieder eindeutig bestimmt, während die nicht-steife Komponente $x(t)$ noch eine Anfangsbedingung erfüllen kann. Ebenso wie im vorigen Beispiel lässt sich zeigen, dass $X_{N+1}(t, \epsilon)$ und $Y_{N+1}(t, \epsilon)$ von der Ordnung $O(\epsilon^{-1})$ sind.

Zusammenfassend lässt sich also vermuten, dass es auch im allgemeinen Fall glatte Lösungen der Variationsgleichungen geben wird. Nicht klar ist allerdings, wie sich das Restglied verhält. Beim impliziten Eulerverfahren lässt sich auch die Restgliedgleichung mit einem diskreten Analogon zur singulären Störungstheorie behandeln, denn dort treten auf Grund der speziellen Gestalt der growth-function G_ν keine Oszillationen auf. Ein ähnlicher Algorithmus bei der impliziten Mittelpunktsregel muss aber versagen, da es kein kontinuierliches Analogon zu einer Oszillation gibt.

Literatur

- [1] G. Dahlquist und B. Lindberg. *On some Implicit One-Step Methods for Stiff Differential Equations*. Techn. Ber. Rep. TRITA-NA-7302. Dept. of Comp. Sci., Royal Inst. of Technology, 1973.
- [2] J.F.B.M. Kraaijevanger. „B-Convergence of the Implicit Midpoint Rule and the Trapezoidal Rule.“ In: *BIT* 25 ((1985)), S. 652–666.
- [3] R.E. O’Malley, Jr. *Introduction to Singular Perturbations*. Academic Press, 1974.
- [4] H. Skarke. „Die Fehlerstruktur der Impliziten Trapezregel bei steifen Differentialgleichungen.“ Diplomarbeit. Institut für Angewandte und Numerische Mathematik der Technischen Universität Wien, 1986.

Kapitel 5

Lebenslauf

Ich, Günter Pollak wurde am 7. Februar 1963 als Sohn von Otto und Eva Pollak in Eisenstadt geboren. Nach der Volksschule besuchte ich das Bundesgymnasium in Mattersburg und legte dort im Juni 1981 die Reifeprüfung mit Auszeichnung ab. In den Jahren 1979, 1980 und 1981 war ich jeweils Mitglied in der von Österreich zur Internationalen Mathematischen Olympiade entsandten Auswahl.

Da ich wegen einer Augenverletzung für die Ableistung der Präsenzdienstes untauglich bin, begann ich im Oktober 1981 an der Technische Universität Wien das Studium der Technischen Mathematik und gleichzeitig jenes der Technischen Physik. Im Oktober 1986 beendete ich das Studium Technischer Mathematik mit der Sponsion zum Diplomingenieur.

Ich begann das Doktoratsstudium am Institut für Theoretische Physik der TU Wien und beendete es im April 1990 mit der Promotion zum Doktor der technischen Wissenschaften.

Nach Berufstätigkeit bei Alcatel und Siemens im Bereich IT und Telekommunikation begann ich parallel zur Lehrtätigkeit an der HBLVA Rosensteingasse im Herbst 2011 auch das Lehramtsstudium in den Fächern Mathematik und Physik an der TU Wien. Im August 2012 legte ich die erste Diplomprüfung ab.

Ich bin seit Januar 2000 verheiratet und mittlerweile Vater von zwei Kindern. Markus Pollak wurde im Februar 2004 geboren, und besucht derzeit das Gymnasium Feldgasse in 1080 Wien. Laura Pollak, geboren im November 2006, beendet heuer die Volksschule Reiserstrasse in 1030 Wien. Sie wird im nächsten Schuljahr ebenfalls das Gymnasium Feldgasse besuchen.